

**Chimie :**

**C.7 Transformations de la matière en solution aqueuse**

Notions et contenus	Capacités exigibles
<b>Transformations modélisées par des réactions d'oxydo-réduction</b> Enthalpie libre standard de réaction et potentiels standard d'oxydo-réduction des couples impliqués.	Déterminer la valeur du potentiel standard d'un couple oxydant-réducteur à partir de données thermodynamiques (constantes thermodynamiques d'équilibre, potentiels standard).
<b>Diagrammes potentiel-pH</b> Lecture et exploitation des diagrammes potentiel-pH. Diagramme potentiel-pH de l'eau.	Attribuer les différents domaines d'un diagramme potentiel-pH fourni à des espèces chimiques données. Prévoir une éventuelle dismutation ou médiamutation en fonction du pH du milieu.

**C.6 Transformations de la matière : évolution temporelle d'un système**

Notions et contenus	Capacités exigibles
Mécanismes par stades. Mécanismes en chaîne : étapes d'initiation, de transfert, maillon de chaîne, étape de rupture de chaîne.	Reconnaître un mécanisme par stades ou un mécanisme en chaîne. Identifier la nature des actes élémentaires dans un mécanisme en chaîne. Associer le maillon de chaîne et l'équation de la réaction modélisée par le mécanisme réactionnel.
Modélisation d'une transformation catalysée : cycle catalytique.	Reconnaître un catalyseur ou un précurseur de catalyseur dans un cycle catalytique fourni. Écrire les équations des actes élémentaires d'un cycle catalytique fourni. Écrire l'équation de la réaction modélisant une transformation catalysée à partir du mécanisme présenté sous forme d'un cycle catalytique.
Modélisation microscopique d'une transformation par deux actes élémentaires successifs.  Traitement cinétique d'un mécanisme : approximation de l'étape cinétiquement déterminante, approximation du pré-équilibre rapide, approximation de l'état quasi-stationnaire.	<b>Capacité numérique :</b> à l'aide d'un langage de programmation, tracer, dans le cas de deux actes élémentaires successifs, l'évolution des concentrations par résolution numérique du système d'équations différentielles et mettre en évidence les conditions d'application de l'approximation de l'état quasi-stationnaire. Reconnaître, à partir d'informations fournies, les conditions d'utilisation de l'approximation de l'étape cinétiquement déterminante, de l'approximation du pré-équilibre rapide et de l'approximation de l'état quasi-stationnaire. Établir une loi de vitesse à partir d'un mécanisme réactionnel et la confronter à la loi de vitesse obtenue expérimentalement. <b>Établir la loi de vitesse d'une réaction pour tester un mécanisme réactionnel.</b>
Sélectivité d'une transformation modélisée par deux réactions : contrôle thermodynamique et contrôle cinétique.	Reconnaître à partir de données expérimentales, les paramètres qui favorisent un contrôle cinétique ou un contrôle thermodynamique. <b>Capacité numérique :</b> établir un système d'équations différentielles et le résoudre numériquement, à l'aide d'un langage de programmation, afin de visualiser l'évolution des concentrations au cours du temps et mettre en évidence les situations de contrôle cinétique ou thermodynamique.

**Chapitre 11 : Transformations modélisées par des réactions d'oxydo-réduction**

**I. Enthalpie libre de réaction et potentiel standard - application à la détermination d'un potentiel standard d'un couple**

**II. Diagramme potentiel-pH**

Diagramme potentiel-pH de l'eau

Lecture et exploitation des diagrammes potentiel-pH

**Chapitre 12 : Mécanismes réactionnels**

- Mécanismes par stade et par chaîne
- Modélisation d'une transformation catalysée : cycle catalytique
- Approximation de l'état quasi-stationnaire (AEQS) : analyse cinétique du système :  $A \rightarrow B \rightarrow C$
- Traitement cinétique d'un mécanisme : ECD, AER, AEQS
- Sélectivité d'une transformation modélisée par deux réactions : contrôle thermodynamique et contrôle cinétique : analyse cinétique du système :  $A \rightleftharpoons B$  et  $A \rightleftharpoons C$

**REVISIONS DE 1<sup>ERE</sup> ANNEE :**

**Transformations modélisées par des réactions d'oxydo-réduction**

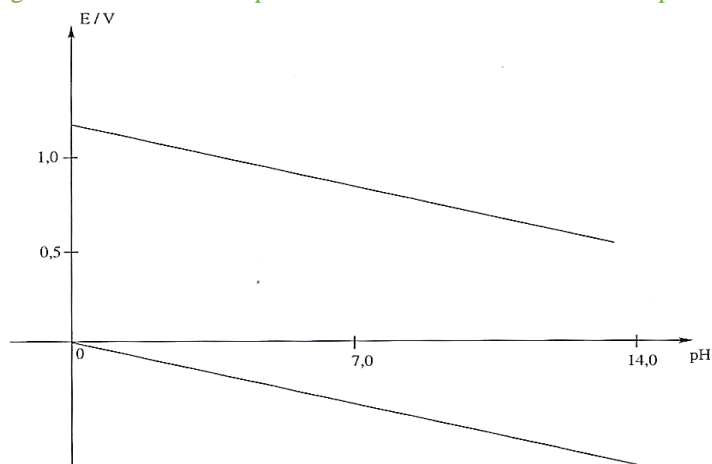
**Cinétique chimique (modélisation macroscopique, modélisation microscopique, catalyseurs)**

## Questions de cours possibles :

### Q1C : Diagramme E-pH de l'eau

Données (à 25°C):  $E^\circ (\text{H}_2\text{O}_{(l)}/\text{H}_2(\text{g})) = 0,0 \text{ V}$  ;  $E^\circ (\text{O}_2(\text{g})/\text{H}_2\text{O}_{(l)}) = 1,23 \text{ V}$

- Répartissez les espèces  $\text{H}_2\text{O}_{(l)}$ ,  $\text{H}_2(\text{g})$  et  $\text{O}_2(\text{g})$  dans les différents domaines du diagramme ci-dessous.
- Etablir les équations des deux droites tracées sur le diagramme en écrivant le potentiel de Nernst de chacun des couples.

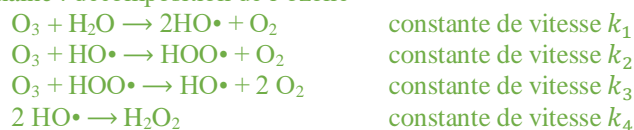


### Q2C : Approximation de l'état quasi-stationnaire (AEQS)

Analyse cinétique du système :  $A \rightarrow B \rightarrow C$  : système d'équations différentielles et résolution par la méthode d'Euler (compléter les lignes 35, 37 et 39)

```
5 #constantes cinétiques
6 k1=1 #min-1
7 k2=10 #min-1
8
9 #conditions initiales
10 CA0=0.10 #mol/L
11 CB0=0 #mol/L
12 CC0=0 #mol/L
13
14 #Détermination de A(t) et B(t) par la méthode d'Euler
15 #créations de listes accueillant le temps et les concentrations de A, B et C
16 #à chaque instant
17 t=[0]
18 CA=[CA0]
19 CB=[CB0]
20 CC=[CC0]
21
22 #paramètres d'intégration par la méthode d'Euler : pas et nombre de points
23 h=0.001 #pas
24 duree = 3 #min
25 N=duree/h #nombre de points
26
27 #boucle pour stocker dans les listes les N valeurs de temps, de [A], [B] et [C]
28 i=1
29 while i<=N and CA[-1]>=0:
30     A=CA[-1]
31     B=CB[-1]
32     C=CC[-1]
33     t.append(i*h)
34
35     CA.append(
36
37     CB.append(
38
39     CC.append(
40
41     i=i+1
```

### Q3C : Mécanisme en chaîne : décomposition de l'ozone



Nature des étapes

Equation-bilan de la réaction

Expression de la vitesse de disparition de l'ozone en supposant que l'on puisse appliquer l'AEQS aux IR (radicaux)

## **Physique :**

### **Chapitre 8 : Dynamique des fluides**

#### **III. Écoulement d'un fluide réel à travers un milieu poreux**

- Porosité, perméabilité
- Loi de Darcy, pression motrice

#### **REVISIONS DE 1<sup>ERE</sup> ANNEE :**

#### **Statique des fluides**

#### **Questions de cours possibles :**

**Q1P :** Soit un milieu poreux de section  $S$  et de profondeur  $L$ , contenant  $n$  pores cylindriques de rayon  $a$  par unité de surface. Etablir l'expression de la porosité de ce matériau. Etablir l'expression du débit volumique par une unité de surface pour ce milieu poreux (loi de Darcy).