

Notions et contenus	Capacités exigibles	Détail
Modélisation d'une transformation par une ou plusieurs réactions chimiques.	Écrire l'équation de la réaction (ou des réactions) qui modélise(nt) une transformation chimique donnée.	<p>On considère la réaction d'équation $\alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2 = \beta_1 B_1 + \beta_2 B_2$ On suppose qu'initialement toutes les espèces sont présentes.</p> <ul style="list-style-type: none"> Écrire le tableau d'avancement en quantité de matière. <div style="border: 1px solid blue; padding: 10px; margin: 10px 0;"> $\begin{array}{ccccccc} & \alpha_1 A_i & + & \alpha_2 A_2 & = & \beta_1 B_1 & + & \beta_2 B_2 \\ \hline \text{EI} & n_{A_1}^0 & & n_{A_2}^0 & & n_{B_1}^0 & & n_{B_2}^0 \\ \text{t} & n_{A_1}^0 - \alpha_1 \xi & & n_{A_2}^0 - \alpha_2 \xi & & n_{B_1}^0 + \beta_1 \xi & & n_{B_2}^0 + \beta_2 \xi \end{array}$ </div> <ul style="list-style-type: none"> A quelle condition peut-on écrire un tableau d'avancement en concentration ? <div style="border: 1px solid blue; padding: 10px; margin: 10px 0;"> <p>Si le système est monophasé de volume constant, alors on peut écrire un tableau d'avancement en concentration. Exemple : un système chimique en phase aqueuse, ou un système chimique gazeux</p> </div> <ul style="list-style-type: none"> Écrire le tableau d'avancement en concentration. <div style="border: 1px solid blue; padding: 10px; margin: 10px 0;"> $\begin{array}{ccccccc} & \alpha_1 A_i & + & \alpha_2 A_2 & = & \beta_1 B_1 & + & \beta_2 B_2 \\ \hline \text{EI} & [A_1]_0 & & [A_2]_0 & & [B_1]_0 & & [B_2]_0 \\ \text{t} & [A_1]_0 - \alpha_1 x & & [A_2]_0 - \alpha_2 x & & [B_1]_0 + \beta_1 x & & [B_2]_0 + \beta_2 x \end{array}$ </div> <p>On considère la réaction $\alpha_1 A_1 = \beta_1 B_1 + \beta_2 B_2$. On suppose que seul le réactif a été initialement introduit en quantité n_0.</p> <ul style="list-style-type: none"> Écrire le tableau d'avancement en utilisant le coefficient de dissociation α. <div style="border: 1px solid blue; padding: 10px; margin: 10px 0;"> $\begin{array}{ccc} & \alpha_1 A_1 & = & \sum_j \beta_j B_j \\ \hline \text{EI} & n_{A_1}^0 & & n_j^0 \\ \text{EF} & n_{A_1}^0 (1 - \tau) & & n_j^0 + n_{A_1}^0 \frac{\beta_j}{\alpha} \tau \end{array}$ </div>

Notions et contenus	Capacités exigibles	Détail																					
<p>Équation de réaction ; constante thermodynamique d'équilibre.</p> <p>Évolution d'un système lors d'une transformation chimique modélisée par une seule réaction chimique : avancement, activité, quotient réactionnel, critère d'évolution.</p>	<p>Déterminer une constante d'équilibre.</p> <p>Décrire qualitativement et quantitativement un système chimique dans l'état initial ou dans un état d'avancement quelconque.</p> <p>Exprimer l'activité d'une espèce chimique pure ou dans un mélange dans le cas de solutions aqueuses très diluées ou de mélanges de gaz parfaits avec référence à l'état standard.</p> <p>Exprimer le quotient réactionnel.</p> <p>Prévoir le sens de l'évolution spontanée d'un système chimique.</p>	<p>On notera l'équation bilan de la réaction : $\sum_i \alpha_i A_i = \sum_j \beta_j B_j$</p> <ul style="list-style-type: none"> Donner l'activité d'un constituant selon son état <table border="1" data-bbox="846 309 2130 571"> <thead> <tr> <th></th> <th colspan="2">solide</th> <th colspan="2">liquide</th> <th colspan="2">vapeur</th> </tr> <tr> <th></th> <th>pur</th> <th>solvant</th> <th colspan="2">soluté</th> <th>un seul GP</th> <th>mélange de GP</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>activité</td> <td>$a = 1$</td> <td>$a = 1$</td> <td colspan="2">$a_i = C_i/C^\circ$, avec $C^\circ = 1 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$</td> <td>$a = P/P^\circ$ avec $P^\circ = 1 \text{ bar}$</td> <td>$a_i = P_i/P^\circ$</td> </tr> </tbody> </table> <p>On note $C^\circ = 1 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ la concentration standard et $P^\circ = 1 \text{ bar}$ la pression standard.</p> <ul style="list-style-type: none"> Définir le quotient réactionnel de la réaction <div data-bbox="846 708 2130 1002" style="border: 1px solid blue; padding: 10px; margin: 10px 0;"> $Q = \frac{\prod_j a(B_j)^{\beta_j}}{\prod_i a(A_i)^{\alpha_i}}$ <p>avec</p> <ul style="list-style-type: none"> $a(X)$, l'activité de l'espèce X α_i et β_j sont les coefficients stoechiométriques </div> <ul style="list-style-type: none"> Définir la constante d'équilibre de la réaction <div data-bbox="846 1070 2130 1169" style="border: 1px solid blue; padding: 10px; margin: 10px 0;"> <p>Si l'équilibre chimique est atteint, alors $Q_{\text{eq}} = K^0(T)$.</p> </div> <ul style="list-style-type: none"> Énoncer le critère d'évolution <div data-bbox="846 1241 2130 1437" style="border: 1px solid blue; padding: 10px; margin: 10px 0;"> <p>D'après le <u>critère d'évolution</u>, la réaction évolue dans le sens tel que le quotient de réaction tende vers la constante d'équilibre.</p> <ul style="list-style-type: none"> si $Q_0 < K^0(T)$ le système évolue dans le <u>sens direct</u> (augmentation de Q) si $Q_0 > K^0(T)$ le système évolue dans le <u>sens indirect</u> (diminution de Q) </div>		solide		liquide		vapeur			pur	solvant	soluté		un seul GP	mélange de GP	activité	$a = 1$	$a = 1$	$a_i = C_i/C^\circ$, avec $C^\circ = 1 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$		$a = P/P^\circ$ avec $P^\circ = 1 \text{ bar}$	$a_i = P_i/P^\circ$
	solide		liquide		vapeur																		
	pur	solvant	soluté		un seul GP	mélange de GP																	
activité	$a = 1$	$a = 1$	$a_i = C_i/C^\circ$, avec $C^\circ = 1 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$		$a = P/P^\circ$ avec $P^\circ = 1 \text{ bar}$	$a_i = P_i/P^\circ$																	

Notions et contenus	Capacités exigibles	Détail
Composition chimique du système dans l'état final : état d'équilibre chimique, transformation totale.	Identifier un état d'équilibre chimique. Déterminer la composition chimique du système dans l'état final, en distinguant les cas d'équilibre chimique ou de transformation totale, pour une transformation modélisée par une réaction chimique unique.	<p>On considère la réaction d'équation $\alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2 = \beta_1 B_1 + \beta_2 B_2$ On suppose qu'initialement seuls les réactifs sont présents.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Réaction peu avancée : <ul style="list-style-type: none"> — Inégalité vérifiée par K : <div style="border: 1px solid blue; padding: 5px; margin: 5px 0;">$K \ll 1 \text{ ou } K < 10^{-4}$</div> — Que peut-on dire des quantités de matière des réactifs et des produits à l'équilibre ? <div style="border: 1px solid blue; padding: 5px; margin: 5px 0;"> <p>L'avancement molaire à l'équilibre ξ_{eq} est faible devant l'avancement maximal (avancement dans l'hypothèse d'une réaction totale) :</p> <div style="border: 1px solid blue; padding: 2px; display: inline-block;">$\xi_{\text{eq}} \ll \xi_{\text{max}}$</div> <p>Par conséquent, pour toutes les espèces sauf les espèces absentes initialement, les quantités de matière à la fin de la réaction sont les mêmes que si la réaction était nulle.</p> </div> • Réaction quantitative (quasi-totale) : <ul style="list-style-type: none"> — Inégalité vérifiée par K : <div style="border: 1px solid blue; padding: 5px; margin: 5px 0;">$K \gg 1 \text{ ou } K > 10^4$</div> — Que peut-on dire des quantités de matière des réactifs et des produits à l'équilibre ? <div style="border: 1px solid blue; padding: 5px; margin: 5px 0;"> <p>L'avancement molaire s'approche de l'avancement maximal : $\xi_{\text{eq}} \approx \xi_{\text{max}}$.</p> <p>Par conséquent, pour toutes les espèces sauf le réactif quasiment totalement consommé, les quantités de matière à la fin de la réaction sont les mêmes que si la réaction était totale.</p> </div>

Notions et contenus	Capacités exigibles	Détail																		
Composition chimique du système dans l'état final : état d'équilibre chimique, transformation totale.	Capacité numérique : déterminer, à l'aide d'un langage de programmation, l'état final d'un système, siège d'une transformation, modélisée par une réaction à partir des conditions initiales et valeur de la constante d'équilibre.	<p>Préciser la fonction python à utiliser, et donner sa syntaxe.</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 10px; margin: 10px 0;"> <pre>from scipy.optimize import bisect def f(x) : return ... a,b = ... sol = bisect(f,a,b)</pre> </div> <p>On écrit l'équation à résoudre sous la forme $f(x) = 0$, à résoudre sur l'intervalle $I = [a, b]$. La fonction f doit être continue sur I, et il faut que $f(a) \times f(b) \leq 0$.</p> <p>Dans un bécher contenant $V = 100$ mL d'une solution aqueuse de sulfate de fer(III) à la concentration initiale en ion fer(III) $C_0 = 5,00 \times 10^{-2} \text{ mol L}^{-1}$, on ajoute $n = 1,00 \times 10^{-3}$ mol de thiocyanate de potassium KSCN solide. Indiquer, à l'équilibre, la concentration finale en ions Fe^{3+}, en ions SCN^-, et en ions complexes FeSCN^{2+}. On donne l'équation de la réaction et sa constante d'équilibre :</p> $\text{Fe}^{3+}(\text{aq}) + \text{SCN}^-(\text{aq}) = \text{FeSCN}^{2+}(\text{aq}) \quad K = 10^{2,3}$ <p>On proposera une résolution numérique pour déterminer l'avancement de la réaction.</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 10px; margin: 10px 0;"> <p>Le milieu réactionnel étant une phase homogène aqueuse, on dresse un tableau d'avancement en concentration en mol L^{-1}. Puis on applique la loi d'action de masse.</p> <table style="margin-left: auto; margin-right: auto; border-collapse: collapse;"> <tr> <td></td> <td style="text-align: center;">$\text{Fe}^{3+}(\text{aq})$</td> <td style="text-align: center;">+</td> <td style="text-align: center;">$\text{SCN}^-(\text{aq})$</td> <td style="text-align: center;">=</td> <td style="text-align: center;">$\text{FeSCN}^{2+}(\text{aq})$</td> </tr> <tr> <td style="border-top: 1px solid black; border-bottom: 1px solid black;">EI</td> <td style="border-top: 1px solid black; border-bottom: 1px solid black; text-align: center;">5×10^{-2}</td> <td style="border-top: 1px solid black; border-bottom: 1px solid black;"></td> <td style="border-top: 1px solid black; border-bottom: 1px solid black; text-align: center;">1×10^{-4}</td> <td style="border-top: 1px solid black; border-bottom: 1px solid black;"></td> <td style="border-top: 1px solid black; border-bottom: 1px solid black; text-align: center;">0</td> </tr> <tr> <td style="border-bottom: 1px solid black;">t_{eq}</td> <td style="border-bottom: 1px solid black; text-align: center;">$5 \times 10^{-2} - x_{\text{eq}}$</td> <td style="border-bottom: 1px solid black;"></td> <td style="border-bottom: 1px solid black; text-align: center;">$1 \times 10^{-4} - x_{\text{eq}}$</td> <td style="border-bottom: 1px solid black;"></td> <td style="border-bottom: 1px solid black; text-align: center;">x_{eq}</td> </tr> </table> $K = \frac{x_{\text{eq}} C^{\circ}}{(5 \times 10^{-2} - x_{\text{eq}}) \times (1 \times 10^{-4} - x_{\text{eq}})} \quad \text{soit} \quad x_{\text{eq}}^2 - x_{\text{eq}} (5,01 \times 10^{-2} + 10^{-2,3}) + 5 \times 10^{-6} = 0$ <p>On résout cette équation sur l'intervalle $[0, x_{\text{max}}]$, avec $x_{\text{max}} = 1 \times 10^{-4}$. On propose le code</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 10px; margin: 10px 0;"> <pre>from scipy.optimize import bisect def f(x) : return x**2-x*(5.01e-2 + 10**-2.3)+5e-6 sol = bisect(f,0,1e-4) print(sol)</pre> </div> <p>On obtient $x_{\text{eq}} = 9,1 \times 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$.</p> </div>		$\text{Fe}^{3+}(\text{aq})$	+	$\text{SCN}^-(\text{aq})$	=	$\text{FeSCN}^{2+}(\text{aq})$	EI	5×10^{-2}		1×10^{-4}		0	t_{eq}	$5 \times 10^{-2} - x_{\text{eq}}$		$1 \times 10^{-4} - x_{\text{eq}}$		x_{eq}
	$\text{Fe}^{3+}(\text{aq})$	+	$\text{SCN}^-(\text{aq})$	=	$\text{FeSCN}^{2+}(\text{aq})$															
EI	5×10^{-2}		1×10^{-4}		0															
t_{eq}	$5 \times 10^{-2} - x_{\text{eq}}$		$1 \times 10^{-4} - x_{\text{eq}}$		x_{eq}															