

Définitions S1.1&2

Extrait programme officiel PCSI

I.1 – Description et évolution d'un système vers un état final lors d'une transformation chimique

1°) Système physico-chimique

Espèces physico-chimiques.

Corps purs et mélanges : concentration en quantité de matière, fraction molaire, pression partielle.

Variables intensives et extensives.

Composition d'un système physico-chimique.

- Recenser les espèces physico-chimiques présentes dans un système.
- Décrire la composition d'un système à l'aide des grandeurs physiques pertinentes.
- Reconnaître le caractère extensif ou intensif d'une variable.

2°) Transformation chimique d'un système

Modélisation d'une transformation par une ou plusieurs réactions chimiques.

Équation de réaction ; constante thermodynamique d'équilibre.

Évolution d'un système lors d'une transformation chimique modélisée par une seule réaction chimique : avancement, activité, quotient réactionnel, critère d'évolution.

- Écrire l'équation de la réaction (ou des réactions) qui modélise(nt) une transformation chimique donnée.
- Déterminer une constante thermodynamique d'équilibre et tester l'influence de différents paramètres sur l'état d'équilibre d'un système.
- Décrire qualitativement et quantitativement un système chimique dans l'état initial ou dans un état d'avancement quelconque.
- 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.
- Exprimer le quotient réactionnel.
- Prévoir le sens de l'évolution spontanée d'un système chimique.

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 et de transformation totale, pour une transformation modélisée par une réaction chimique unique.

Optimisation d'un procédé chimique :

- par modification de la valeur de K° ;
- par modification de la valeur du quotient de réaction.

- Identifier les paramètres d'influence d'un état d'équilibre et leur contrôle pour optimiser une synthèse ou minimiser la formation d'un produit secondaire indésirable.

Définitions

Espèce physico-chimique : c'est une espèce de composition chimique définie et d'état physique fixé.

Phase : en chimie, c'est un milieu dans lequel les paramètres varient de manière continue.

Corps pur : c'est une phase ne comportant qu'une seule espèce chimique.

Mélange : c'est une phase comportant plusieurs espèces chimiques.

Solution : c'est un mélange constitué d'un solvant et de solutés.

Solvant : c'est l'espèce chimique majoritaire (principal) d'une solution (mélange).

Soluté : c'est une espèce chimique minoritaire d'une solution (mélange), elle est dissoute dans le solvant.

Gaz : c'est un ensemble d'atomes ou de molécules très faiblement liés et éloignés les uns des autres ; les interactions y sont quasi inexistantes.

Gaz parfait : lorsque la pression est faible, les molécules de gaz sont suffisamment éloignées les unes des autres pour que l'on puisse négliger les interactions.

Liquide : c'est un ensemble de molécules faiblement liées mais proches les unes des autres, ce qui rend les liquides parfaitement déformables ; les interactions ne sont pas négligeables, une molécule ne peut s'éloigner beaucoup d'une autre, ce qui fait que la matière liquide a une cohésion que ne possède pas le gaz.

Solide : c'est un ensemble d'atomes ou d'ions ou de molécules fortement liés, proches les uns des autres et quasi immobiles ; les interactions y sont très présentes et le solide a une forme propre.

Fluide : Un fluide est un milieu matériel parfaitement déformable (une de ses propriétés et de s'adapter à la forme de son contenant).

Compressible : c'est la caractéristique d'un corps qui subit une variation de volume sous l'effet d'une pression appliquée.

Système physico-chimique : Ensemble des phases prises en compte dans l'étude. Un état de ce système est caractérisé par la donnée de certaines grandeurs physiques, pouvant être intensives ou extensives.

Grandeur extensive : Elle est relative à une phase en entier, elle constitue un stock contenu dans cette phase. Elle est additive lors de la réunion de deux phases identiques.

Grandeur intensive : Elle est définie en chaque point du système, elle décrit une propriété locale. Un système dans lequel les grandeurs intensives sont identiques en tout point est dit homogène.

Transformation chimique : c'est le passage d'un ou de plusieurs corps à d'autres corps différents des premiers. La réaction chimique est un modèle qui rend compte de l'évolution macroscopique du système lors de la transformation chimique.

Réactif : en chimie, le réactif est l'espèce qui disparaît au cours d'une réaction chimique.

Produit : en chimie, le produit est l'espèce qui se forme au cours d'une réaction chimique.

Espèce spectatrice : en chimie, une espèce spectatrice est une espèce chimique dont la quantité de matière n'est pas modifiée au cours d'une réaction chimique.

Équation de réaction : appelée aussi équation chimique ou équation bilan, c'est un écrit symbolique qui modélise la transformation d'espèces chimiques lors d'une réaction chimique. Elle peut se présenter sous plusieurs formes.

Stœchiométrie : en chimie, la stœchiométrie est le calcul des relations quantitatives entre réactifs et produits au cours d'une réaction chimique.

Coefficient stœchiométrique : le coefficient stœchiométrique d'une espèce chimique est le coefficient qui lui est affecté dans l'équation chimique considérée.

Degré d'avancement de la réaction chimique : c'est une grandeur physique homogène à une quantité de matière (unité en mole) qui donne l'évolution quantitative des espèces physico-chimiques qui apparaissent dans une équation de réaction ; on le note ξ .

Réaction totale : la réaction se produit jusqu'à épuisement complet du ou des réactifs en défaut ; ce ou ces derniers ne sont plus présents dans le système et le degré d'avancement de la réaction chimique est maximal, on le note ξ_{\max} .

Réaction équilibrée : la réaction ne se produit pas totalement ; tous les espèces sont présentes dans le système (en quantité variable mais non-nulle) et le degré d'avancement de la réaction chimique n'est pas maximal, on a $\xi_{\text{eq}} < \xi_{\max}$.

Réaction quasi-totale : c'est une réaction équilibrée qui se produit jusqu'à disparition quasi-totale de l'un ou de plusieurs des réactifs ; aucune espèce ne disparaît totalement du système, mais un ou plusieurs réactifs sont en quantité négligeable ; le degré d'avancement de la réaction chimique est quasi-maximal, on a $\xi_{\text{eq}} \approx \xi_{\max}$.

Tableau d'avancement : c'est l'outil qui permet de relier les quantités de matières des espèces chimiques, les coefficients stœchiométriques de ces mêmes espèces et le degré d'avancement de la réaction chimique grâce à l'équation de réaction au cours d'une transformation chimique.

Équilibre chimique : en première approximation, c'est quand la composition quantitative du système physico-chimique n'évolue plus. En toute rigueur, on le définit ainsi : un système chimique est à l'équilibre lorsque les variables intensives qui le décrivent (température, pression et activités chimiques des réactifs et des produits) sont homogènes dans tout le système et restent constantes au cours du temps.

Taux d'avancement de la réaction chimique : c'est le rapport de la quantité matière du réactif limitant ayant réagi sur sa quantité de matière initiale, il est noté τ .

Équivalence : c'est lorsque les réactifs ont été introduits dans les proportions stœchiométriques de l'équation de la réaction de dosage. On parle aussi de point équivalent et on détermine expérimentalement le volume équivalent.

Capacités exigibles

- Utilisation d'un vocabulaire précis.
- Utilisation d'une notation précise.
- Loi des gaz parfait.
- Relations entre les différentes grandeurs caractéristiques en fonction des situations (masse volumique, densité, quantité de matière, masse molaire, fraction molaire et massique, concentration apportée d'un soluté en quantité de matière et en masse, quantité de matière de soluté prélevé).
- Savoir équilibrer une équation de réaction.
- Savoir construire un tableau d'avancement.
- Reconnaître les proportions stœchiométriques ou un large excès.
- Savoir utiliser un tableur (Excell ou LibreOffice).
- Savoir utiliser ou modifier un programme python.

Capacité numérique

Composition chimique du système dans l'état final : déterminer, à l'aide d'un langage de programmation, l'état final d'un système à l'équilibre, siège d'une transformation, modélisée par une ou deux réactions à partir des conditions initiales et valeur(s) de la(es) constante(s) thermodynamique(s) d'équilibre.

Incertitudes-types composées : simuler, à l'aide d'un langage de programmation ou d'un tableur, un processus aléatoire de type Monte Carlo permettant de caractériser la variabilité de la valeur d'une grandeur composée.

Régression linéaire : à l'aide d'un langage de programmation ou d'un tableur, simuler un processus aléatoire de variation des valeurs expérimentales de l'une des grandeurs – simulation Monte-Carlo – pour évaluer l'incertitude type sur les paramètres du modèle.