

Révisions de cinétique chimique (PCSI -PC 1^{ère} année)

Programme dans sa totalité

+

Thermodynamique chimique / Evolution des systèmes physico-chimiques

- **Transfert thermique** lors d'une transformation chimique réalisée à T et P fixées
- Température maximale atteinte lors d'une transformation chimique adiabatique , monobare , monotherme
- **Conditions d'évolution et d'équilibre pour un système chimique** siège d'une ou plusieurs réactions
- **L'état d'équilibre**
Relations de définition d'une constante d'équilibre
Expression de la constante d'équilibre
Calcul d'une constante d'équilibre
- **T facteur d'équilibre**
Relation de Van't Hoff , effet d'une variation de température et optimisation , (*température d'inversion*)

Programme 2^{ème} année

Notions et continus	Capacités exigibles
Fonctions d'onde électroniques ψ de l'atome d'hydrogène. Nombres quantiques n, l, ml, ms. Énergie et rayon associés à une fonction d'onde.	Interpréter $ \psi ^2$ comme la densité de probabilité de présence d'un électron en un point et la relier à la densité de charge. Prévoir qualitativement, pour l'atome d'hydrogène et les ions hydrogénoïdes, l'évolution du rayon et de l'énergie associés à une fonction d'onde en fonction du nombre quantique principal.
Orbitales des atomes polyélectroniques, représentation schématique. Configuration électronique d'un atome et d'un ion monoatomique. Électrons de coeur et de valence.	Dessiner l'allure des orbitales atomiques s et p. Établir la configuration électronique d'un atome ou d'un ion à l'état fondamental. Déterminer le nombre d'électrons non appariés d'un atome dans son état fondamental
Notion qualitative de charge effective. Électronégativité. Rayon d'une orbitale atomique, polarisabilité	Relier qualitativement le rayon associé à une orbitale atomique à la charge effective. Relier qualitativement l'énergie associée à une orbitale atomique à l'électronégativité de l'atome. Relier qualitativement le rayon associé aux orbitales de valence d'un atome à sa polarisabilité.
Architecture du tableau périodique des éléments. Organisation par blocs.	Relier la position d'un élément dans le tableau périodique à la configuration électronique de l'atome associé dans son état fondamental Situer dans le tableau les familles suivantes : métaux alcalins et alcalino-terreux, halogènes et gaz nobles

Effets thermiques lors d'une transformation monobare : - transfert thermique associé à la transformation chimique monobare monotherme ; - variation de température lors d'une transformation monobare et adiabatique	Prévoir le sens et calculer la valeur du transfert thermique entre un système, siège d'une transformation physico chimique monobare et monotherme, et le milieu extérieur. Évaluer la température atteinte par un système siège d'une transformation physico-chimique, monobare et adiabatique. Déterminer une enthalpie standard de réaction .
--	---

<p>Enthalpie de réaction, entropie de réaction, enthalpie libre de réaction ; grandeurs standard associées.</p> <p>Relation entre enthalpie libre de réaction et quotient de réaction.</p> <p>Équilibre physico-chimique.</p> <p>Constante thermodynamique d'équilibre ; relation de Van't Hoff.</p> <p>Relation entre enthalpie libre de réaction, constante thermodynamique d'équilibre et quotient de réaction</p>	<p>Justifier qualitativement ou prévoir le signe de l'entropie standard de réaction.</p> <p>Relier enthalpie libre de réaction et création d'entropie lors d'une transformation d'un système physico-chimique.</p> <p>Prévoir le sens d'évolution d'un système physicochimique dans un état donné à l'aide de l'enthalpie libre de réaction.</p> <p>Déterminer une grandeur standard de réaction à l'aide de données thermodynamiques et de la loi de Hess.</p> <p>Déterminer la valeur de la constante thermodynamique d'équilibre à une température quelconque.</p> <p>Déterminer la composition chimique d'un système dans l'état final, en distinguant les cas d'équilibre chimique et de transformation totale, pour une transformation modélisée par une ou plusieurs réactions chimiques.</p> <p>Capacité numérique : tracer, à l'aide d'un langage de programmation, le taux d'avancement à l'équilibre en fonction de la température pour un système siège d'une transformation chimique modélisée par une seule réaction</p>
--	---

Programme cinétique

Notions et contenus	Capacités exigibles
<p>Cinétique en réacteur fermé de composition uniforme</p> <p>Vitesses volumiques de consommation d'un réactif et de formation d'un produit.</p> <p>Vitesse de réaction pour une transformation modélisée par une réaction chimique unique (supposée sans accumulation d'intermédiaires)</p>	<p>Relier la vitesse de réaction, dans les cas où elle est définie, à la vitesse volumique de consommation d'un réactif ou de formation d'un produit.</p>
<p>Lois de vitesse : réactions sans ordre, réactions avec ordre simple (0, 1, 2), ordre global, ordre apparent.</p> <p>Temps de demi-vie d'un réactif, temps de demi-réaction.</p>	<p>Établir une loi de vitesse à partir du suivi temporel d'une grandeur physique.</p> <p>Exprimer, pour une transformation modélisée par une seule réaction chimique, la loi de vitesse si la réaction chimique admet un ordre et déterminer la valeur de la constante de vitesse à une température donnée.</p> <p>Déterminer la vitesse de réaction à différentes dates en utilisant une méthode numérique ou graphique.</p> <p>Déterminer un ordre de réaction à l'aide de la méthode différentielle ou à l'aide des temps de demi-réaction.</p> <p>Confirmer la valeur d'un ordre par la méthode intégrale, en se limitant strictement à une décomposition d'ordre 0, 1 ou 2 d'un unique réactif, ou se ramenant à un tel cas par dégénérescence de l'ordre ou conditions initiales stoechiométriques</p> <p>Capacité numérique : à l'aide d'un langage de programmation ou d'un logiciel dédié, et à partir de données expérimentales, tracer l'évolution temporelle d'une concentration, d'une vitesse volumique de formation ou de consommation, d'une vitesse de réaction et tester une loi de vitesse donnée.</p>
<p>Loi empirique d'Arrhenius ; énergie d'activation</p>	<p>Déterminer l'énergie d'activation d'une réaction chimique.</p> <p>Déterminer la valeur de l'énergie d'activation d'une réaction chimique à partir de valeurs de la constante cinétique à différentes températures.</p>
<p>Facteurs concentration et température en stratégie de synthèse et d'analyse : dilution, chauffage, reflux, trempé.</p>	<p>Reconnaître, dans un protocole, des opérations visant à augmenter ou à diminuer une vitesse de réaction</p>

Notions et contenus	Capacités exigibles
<p>Modélisation microscopique d'une transformation chimique Modélisation d'une transformation par deux actes élémentaires opposés, état d'équilibre d'un système</p>	<p>Relier la constante thermodynamique d'équilibre aux constantes de vitesse dans le cas d'une transformation modélisée par deux actes élémentaires opposés.</p>
<p>Modélisation d'une transformation par un mécanisme constitué par plusieurs actes élémentaires successifs ; étape cinétiquement déterminante, approximation de l'état quasi-stationnaire, équilibre rapidement établi, loi de vitesse associée</p>	<p>Capacité numérique : établir un système d'équations différentielles et le résoudre numériquement afin de visualiser l'évolution temporelle des concentrations et de leurs dérivées dans le cas d'un mécanisme à deux actes élémentaires successifs. Mettre en évidence l'étape cinétiquement déterminante ou l'approximation de l'état quasi-stationnaire d'un intermédiaire réactionnel. Reconnaitre, à partir d'informations fournies, l'étape cinétiquement déterminante d'un mécanisme ou les conditions d'utilisation de l'approximation de l'état quasi-stationnaire d'un intermédiaire réactionnel. Établir la loi de vitesse de consommation d'un réactif ou de formation d'un produit à partir d'un mécanisme réactionnel simple et d'informations fournies.</p>
<p>Contrôle cinétique, contrôle thermodynamique</p>	<p>Reconnaitre les paramètres qui favorisent la formation d'un produit dans le cas de deux réactions compétitives. Capacité numérique : établir un système d'équations différentielles et le résoudre numériquement, avec un langage de programmation, afin de visualiser l'évolution des concentrations au cours du temps pour mettre en évidence les situations de contrôle cinétique ou thermodynamique.</p>
<p>Catalyse Catalyse d'une transformation, intervention du catalyseur dans le mécanisme réactionnel, sélectivité</p>	<p>Reconnaitre un effet catalytique dans un mécanisme réactionnel ou sur un profil énergétique. Reconnaitre un effet de sélectivité par action d'un catalyseur.</p>
<p>Catalyse enzymatique, site actif d'une enzyme, complexe enzyme-substrat.</p>	<p>Établir la loi de vitesse de consommation d'un réactif ou de formation d'un produit à partir d'un mécanisme de catalyse enzymatique fourni. Identifier, à partir d'informations structurales, les interactions mises en jeu entre le site actif d'une enzyme et son substrat et interpréter le rôle catalytique de l'enzyme.</p>