

## Thermodynamique chimique / Evolution des systèmes physico-chimiques

### - Optimisation d'un procédé chimique , déplacement et rupture d'équilibre

(La justification nécessite de présenter un raisonnement basé sur  $\Delta_r G$ )

### -variance et nombre de degrés de liberté : définitions , calculs ( N-R ) , signification

► Retour sur les diagrammes binaires : nombre de degrés de liberté sur les différentes parties d'une courbe d'analyse thermique

### - Phénomènes d'osmose , pression osmotique

## Structure des entités moléculaires

### -Révisions PCSI- PC 1<sup>ère</sup> année : *Modèle de Lewis , modèle VSEPR , modèle de la mésomérie*

( *structure de Lewis , géométrie autour d'un atome et géométrie d'une molécule , moment dipolaire d'une liaison , d'une molécule* )

### - **Modèle quantique**

Approximations ,notions d'OM et de recouvrement

Interactions entre 2 OA

Symétrie  $\sigma$  ou  $\pi$  , caractère liant ou anti-liant

Diagramme des OM pour  $A_2$  sans interaction s-p

Indice ou ordre de liaison , propriétés par ou diamagnétiques , état de spin , HO , BV et SO : **simplement**

### **les identifier**

Optimisation d'un procédé chimique : - par modification de la valeur de $K^\circ$ ; - 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.
Nombre de degrés de liberté d'un système physico-chimique à l'équilibre ; variance	Reconnaître si une grandeur intensive est ou non un facteur d'équilibre. Dénombrer les degrés de liberté d'un système à l'équilibre et interpréter le résultat
Osmose, pression osmotique d'une solution	Utiliser le potentiel chimique pour interpréter le transfert d'un solvant au travers d'une membrane. Relier la pression osmotique à la différence de potentiel chimique du solvant dans les deux phases.

### *Programme PC 1<sup>ère</sup> année*

Notions et contenus	Capacités exigibles
<b>Modèle de Lewis de la liaison covalente</b> Liaison covalente localisée ; longueur et énergie de la liaison covalente. Schéma de Lewis d'une molécule ou d'un ion monoatomique ou polyatomique (étude limitée aux éléments des blocs s et p)..	Citer l'ordre de grandeur de longueurs et d'énergies de liaison covalente. Déterminer, pour les éléments des blocs s et p, le nombre d'électrons de valence d'un atome à partir de la position de l'élément dans le tableau périodique. Citer les éléments des périodes 1 à 3 du tableau périodique (nom, symbole, numéro atomique). Établir un ou des schémas de Lewis pertinent(s) pour une molécule ou un ion.
Liaison covalente délocalisée : mésomérie	Identifier et représenter les enchainements donnant lieu à une délocalisation électronique. Mettre en évidence une éventuelle délocalisation électronique à partir de données expérimentales

<p><b>Géométrie et polarité des entités chimiques</b> Structure géométrique d'une molécule ou d'un ion polyatomique. Modele VSEPR. Representation de Cram.</p>	<p>Associer qualitativement la geometrie d'une entite a la minimisation de son energie. Prevoir et interpreter les structures de type AX<sub>n</sub> avec <math>n \leq 4</math> et AX<sub>p</sub>E<sub>q</sub>, avec <math>p+q = 3</math> ou <math>4</math>.</p>
<p>Electronegativite : liaison polarisee, moment dipolaire, molecule polaire</p>	<p>Comparer les electronegativites de deux atomes à partir de donnees ou de leurs positions dans le tableau periodique. Prevoir la polarisation d'une liaison a partir des électronégativités comparées des deux atomes mis en jeu. Relier l'existence ou non d'un moment dipolaire permanent a la structure géométrique d'une molécule. Déterminer direction et sens du vecteur moment dipolaire d'une liaison ou d'une molécule</p>

### **Programme PC 2ème année**

Notions et contenus	Capacités exigibles
<p><b>Construction des orbitales moléculaires</b></p> <p>Méthode de Combinaison Linéaire des Orbitales Atomiques.</p> <p>Interaction de deux orbitales atomiques sur deux centres :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- recouvrement ;</li> <li>- orbitales liante, antiliante, non liante ;</li> <li>- énergie d'une orbitale moléculaire ;</li> <li>- orbitale <math>\sigma</math>, orbitale <math>\pi</math> ;</li> <li>- représentation conventionnelle d'une orbitale moléculaire par schématisation graphique de la combinaison linéaire des orbitales atomiques.</li> </ul> <p>Ordre de liaison dans les molécules diatomiques.</p>	<p><b>Capacités exigibles</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>-Identifier les conditions d'interaction de deux orbitales atomiques : recouvrement et critère énergétique.</li> <li>-Construire des orbitales moléculaires de molécules diatomiques par interaction d'orbitales atomiques du même type (s-s, p-p).</li> <li>-Reconnaître le caractère liant, antiliant, non liant d'une orbitale moléculaire à partir de sa représentation conventionnelle ou d'une surface d'iso-densité.</li> <li>-Identifier la symétrie <math>\sigma</math> ou <math>\pi</math> d'une orbitale moléculaire à partir de sa représentation conventionnelle ou d'une surface d'iso-densité.</li> <li>-Proposer une représentation conventionnelle d'une orbitale moléculaire tenant compte d'une éventuelle dissymétrie du système.</li> <li>-Justifier la dissymétrie d'une orbitale moléculaire obtenue par interaction d'orbitales atomiques centrées sur des atomes d'éléments différents.</li> <li>-Prévoir ou interpréter l'ordre énergétique des orbitales moléculaires et établir qualitativement un diagramme énergétique d'orbitales d'une molécule diatomique.</li> </ul> <p>Relier, dans une molécule diatomique, l'évolution des caractéristiques de la liaison à l'évolution de l'ordre de liaison.</p>