

CTM1 : MOLECULES et SOLVANTS

Interactions intramoléculaires

- liaison covalente, théorie de Lewis et règle de l'octet
- méthodologie pour la détermination d'une formule de Lewis
- exception : hypervalence, composés radicalaires, acides de Lewis
- électronégativité, polarisation des liaisons, moment dipolaire d'une liaison
- principe de la répulsion des paires d'électrons, moment dipolaire d'une molécule

Interactions intermoléculaires

- interaction de Van der Waals : interaction entre dipôles permanents/permanents, permanents/induits, instantanés/induits (Keesom, London, Debye), application (interprétation de l'évolution des températures de vaporisation, différents états physiques)
- interactions par pont hydrogène ou liaison hydrogène : définition, exemple de l'ADN et application (interprétation des températures de vaporisation de NH_3 , HF , H_2O)
- caractéristiques et comparatifs des liaisons intra et inter : énergie de liaison et longueur de la liaison

Solvants moléculaires

- caractéristiques : permittivité, moment dipolaire, proticité
- classement des solvants
- solubilité, miscibilité

CTM2 : DESCRIPTION ET EVOLUTION D'UN SYSTEME PHYSICO-CHIMIQUE

Description d'un système physico-chimique

- définition, vocabulaire
- constitution : corps pur, mélange
- paramètres de composition : concentration molaire/massique (définition, passage de l'une à l'autre), titre molaire/massique (définition, passage de l'une à l'autre), pression partielle (définition, loi de Dalton)

Transformation chimique

- paramètre d'évolution : avancement, taux d'avancement
- quotient de réaction Q et activité d'une espèce chimique (solide pur, liquide pur, GP pur, soluté au sein d'une solution très diluée, solvant, GP dans un mélange idéal de GP)
- loi de l'équilibre (appelé aussi loi d'action de masse) : notion d'état d'équilibre chimique, énoncé de la loi, prévision du sens d'évolution d'un système
- constante thermodynamique d'équilibre et nature des réactions : favorisées et défavorisées, très peu avancées, quantitative, modèle de la réaction totale, détermination d'une constante à partir d'autres ctes
- détermination de la composition d'un système à l'état final
- capacité numérique : méthode dichotomique, application, application à la détermination de l'état final



John Dalton
(chimiste anglais 1766-1844)

CTM3 : EVOLUTION TEMPORELLE DES SYSTEMES CHIMIQUES

Définition des vitesses volumiques

- Vitesse de disparition / formation
- Vitesse de réaction et lien avec les vitesses de disparition / formation

1^{er} facteur cinétique : concentrations

- Loi de vitesse et notion d'ordre
- Simplification de la loi de vitesse : mélange stoechiométrique, dégénérescence de l'ordre
- Méthode de détermination de l'ordre : méthode intégrale (appliquées aux réactions totales d'ordre 0, 1, et 2 avec un unique réactif ou avec un mélange stoechiométrique), méthode différentielle (ou la variante : méthode des vitesses initiales), utilisation de la dépendance des temps de demi-réaction vis-à-vis de la concentration initiale en réactif, utilisation de l'unité de k

2^{ème} facteur cinétique : température

- Loi d'Arrhenius
- Détermination de l'énergie d'activation

Détermination expérimentale de la concentration et de la vitesse

- Cas de la concentration
- Cas de la vitesse : capacité numérique (dérivation numérique)



Svante Arrhenius
Svante Arrhenius
(chimiste suédois 1859-1927)

EXTRAIT DU PROGRAMME de MPSI

Notions et contenus	Capacités exigibles
4.1.1. Description d'un système et de son évolution vers un état final	
Système physico-chimique Espèces physico-chimiques.	Recenser les espèces physico-chimiques présentes dans un système.
Corps purs et mélanges : concentration en quantité de matière, fraction molaire, pression partielle. Composition d'un système physico-chimique Variables intensives et extensives.	Décrire la composition d'un système à l'aide des grandeurs physiques pertinentes. Identifier le caractère extensif ou intensif d'une variable.
Transformation chimique d'un système 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.
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.	Déterminer une constante d'équilibre. 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 ou de transformation totale, pour une transformation modélisée par une réaction chimique unique. <u>Capacité numérique</u> : 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.

EXTRAIT DU PROGRAMME de MPSI

Notions et contenus	Capacités exigibles
4.1.2. Évolution temporelle d'un système chimique	
Cinétique en réacteur fermé de composition uniforme Vitesses de consommation d'un réactif et de formation d'un produit. Vitesse de réaction pour une transformation modélisée par une réaction chimique unique supposée sans accumulation d'intermédiaires.	Relier la vitesse de réaction, dans les cas où elle est définie, à la vitesse de consommation d'un réactif ou de formation d'un produit.
Lois de vitesse : réactions sans ordre, réactions avec ordre simple (0, 1, 2), ordre global, ordre apparent. Temps de demi-vie d'un réactif, temps de demi-réaction.	Exprimer la loi de vitesse si la réaction chimique admet un ordre et déterminer la valeur de la constante cinétique à une température donnée. Déterminer la vitesse de réaction à différentes dates en utilisant une méthode numérique ou graphique. Déterminer un ordre de réaction à l'aide de la méthode différentielle ou à l'aide des temps de demi-réaction. 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 stœchiométriques. Établir une loi de vitesse à partir du suivi temporel d'une grandeur physique.
Loi d'Arrhenius ; énergie d'activation.	Déterminer la valeur de l'énergie d'activation d'une réaction chimique à partir de valeurs de la constante cinétique à différentes températures. Déterminer l'énergie d'activation d'une réaction chimique.