

cristallographie PCSI

Notions et contenus	Capacités exigibles
<p>Modèle du cristal parfait Solides amorphes, cristallins, semi-cristallins, polycristallins ; variétés allotropiques.</p> <p>Description du modèle du cristal parfait ; population, coordinence, compacité, masse volumique.</p>	<p>Illustrer l'influence des conditions expérimentales sur la formation de solides et de solides cristallins.</p> <p>Décrire un cristal parfait comme un assemblage de mailles parallélépipédiques. Déterminer la population, la coordinence et la compacité pour une structure fournie. Déterminer la valeur de la masse volumique d'un matériau cristallisé selon une structure cristalline fournie.</p>
Rayons métallique, covalent, de van der Waals ou ionique et évolution dans le tableau périodique.	Relier le rayon métallique, covalent, de van der Waals ou ionique, selon le cas, aux paramètres d'une maille donnée. Citer l'ordre de grandeur de ces rayons.
Modèles d'empilement compact de sphères identiques. Maille conventionnelle CFC et ses sites interstitiels.	<p>Utiliser un logiciel ou des modèles cristallins pour visualiser des mailles et des sites interstitiels et pour déterminer des paramètres géométriques.</p> <p>Localiser les interstices tétraédriques et octaédriques entre les plans d'empilement. Localiser et dénombrer les sites tétraédriques et octaédriques d'une maille CFC et déterminer leur habitabilité.</p>
Limites du modèle du cristal parfait.	Confronter des données expérimentales aux prévisions du modèle.
<p>Métaux et alliages Cohésion et propriétés physiques des métaux.</p>	<p>Positionner dans le tableau périodique et reconnaître métaux et non métaux. Relier les caractéristiques de la liaison métallique (ordre de grandeur énergétique, non directionnalité) aux propriétés macroscopiques des métaux.</p>
Alliages de substitution et d'insertion.	Citer des exemples d'alliage et leur intérêt par rapport à des métaux purs. Prévoir la possibilité de réaliser des alliages de substitution ou d'insertion selon les caractéristiques des atomes mis en jeu.
<p>Solides covalents et moléculaires Cohésion et propriétés physiques des solides covalents et moléculaires.</p>	<p>Identifier les liaisons covalentes, les interactions de van der Waals et les liaisons hydrogène dans un cristal de structure donnée. Relier les caractéristiques des liaisons covalentes, des interactions de van der Waals et des liaisons hydrogène (directionnalité ou non, ordre de grandeur des énergies mises en jeu) et les propriétés macroscopiques des solides correspondants. Comparer les propriétés macroscopiques du diamant et du graphite et interpréter les différences en relation avec les structures microscopiques (structures cristallines fournies).</p>
<p>Solides ioniques Cohésion et propriétés physiques des solides ioniques.</p> <p>Rayon ionique.</p>	<p>Relier les caractéristiques de l'interaction ionique dans le cadre du modèle du solide ionique parfait (ordre de grandeur de l'énergie d'interaction, non directionnalité, charge localisée) avec les propriétés macroscopiques des solides ioniques. Comparer le rayon d'un atome et ceux de ses ions. Associer la tangence anion-cation et la non tangence anion-anion, dans une structure cubique de type AB fournie, à la valeur du paramètre de maille.</p>

thermochimie PC

- chap A.1 - thermochimie : enthalpie de réaction - calcul de T_{max}

Notions et contenus	Capacités exigibles
État standard. Enthalpie standard de réaction. Loi de Hess. État standard de référence d'un élément, enthalpie standard de formation. Enthalpie standard de dissociation de liaison.	Déterminer une enthalpie standard de réaction à l'aide de données thermodynamiques.
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. Capacité numérique : tracer, à l'aide d'un langage de programmation, l'évolution temporelle de la température pour un système siège d'une transformation adiabatique modélisée par une seule réaction chimique dont les caractéristiques cinétiques et l'enthalpie standard de réaction sont données. Déterminer une enthalpie standard de réaction.

semaine 3 (du 16/09/24 au 21/09/24)

thermochimie PC

- chap A.1 - thermochimie : enthalpie de réaction - calcul de T_{max}

- chap A.2 - thermochimie : identités thermodynamiques - potentiel chimique - osmose

Notions et contenus	Capacités exigibles
Identités thermodynamiques ; potentiel chimique. Entropie, entropie molaire standard absolue. Enthalpie libre.	Écrire les identités thermodynamiques pour les fonctions U , H et G . Distinguer et justifier le caractère intensif ou extensif des grandeurs physiques utilisées. Interpréter qualitativement une variation d'entropie en termes de nombre de micro-états accessibles.
Potentiel chimique dans le cas modèle des gaz parfaits : $\mu = \mu^{\circ}(T) + RT \cdot \ln(p/p^{\circ})$ Potentiel chimique $\mu = \mu^{\circ} + RT \cdot \ln a$, dans les cas modèles de : - espèces chimiques en phase condensée en mélange idéal ; - solutés infiniment dilués.	Établir l'expression du potentiel chimique dans le cas modèle des gaz parfaits purs. Utiliser le potentiel chimique pour prévoir l'évolution d'un système contenant une espèce chimique dans plusieurs phases. Exprimer l'enthalpie libre d'un système chimique en fonction des potentiels chimiques.
Influence de la pression sur μ° pour des espèces en phase condensée.	Déterminer une variation d'enthalpie libre, d'enthalpie et d'entropie entre deux états du système chimique.
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.

- chap A.3 - thermochimie : grandeurs de réaction - constante d'équilibre

Notions et contenus	Capacités exigibles
Enthalpie de réaction, entropie de réaction, enthalpie libre de réaction ; grandeurs standard associées. Relation entre enthalpie libre de réaction et quotient de réaction. Équilibre physico-chimique. Constante thermodynamique d'équilibre ; relation de van't Hoff.	Justifier qualitativement ou prévoir le signe de l'entropie standard de réaction. Relier enthalpie libre de réaction et création d'entropie lors d'une transformation d'un système physico-chimique. Prévoir le sens d'évolution d'un système physico-chimique dans un état donné à l'aide de l'enthalpie libre de réaction.
Relation entre enthalpie libre de réaction, constante thermodynamique d'équilibre et quotient de réaction.	Déterminer une grandeur standard de réaction à l'aide de données thermodynamiques et de la loi de Hess. Déterminer la valeur de la constante thermodynamique d'équilibre à une température quelconque. 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. 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.

semaine 4 (du 23/09/24 au 28/09/24)

thermochimie PC

- les 4 premiers chapitres de thermochimie :

- chap A.1 - thermochimie : enthalpie de réaction - calcul de T_{max}

- chap A.2 - thermochimie : identités thermodynamiques - potentiel chimique - osmose

- chap A.3 - thermochimie : grandeurs de réaction - constante d'équilibre

- chap A.4 - thermochimie : variance - déplacement d'équilibre - grandeurs d'activation

Notions et contenus	Capacités exigibles
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.
Enthalpie libre standard d'activation, enthalpie standard d'activation, entropie standard d'activation.	Déterminer une enthalpie standard ou une entropie standard d'activation à partir de données cinétiques, la relation d'Eyring étant fournie. Relier l'entropie standard d'activation aux contraintes dans l'état de transition. Interpréter l'action d'un catalyseur à l'aide de données sur les enthalpies et entropies standard d'activation.

- attention au programme de PCSI :

Notions et contenus	Capacités exigibles
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.

thermochimie PC

- chap A.5 - diagrammes binaires L-V :

Notions et contenus	Capacités exigibles
<p>Corps pur, mélange, système binaire, fractions molaire et massique.</p> <p>Miscibilité totale, partielle ou nulle.</p>	<p>Convertir des fractions molaires en fractions massiques dans le cas de systèmes binaires et inversement.</p> <p>Interpréter la miscibilité à l'échelle microscopique par les interactions entre entités.</p> <p>Citer la température comme facteur d'influence de la miscibilité.</p>
<p>Diagrammes isobares d'équilibre liquide-vapeur :</p> <ul style="list-style-type: none"> - avec miscibilité totale à l'état liquide, - avec miscibilité nulle à l'état liquide, - avec miscibilité partielle à l'état liquide. <p>Théorème des moments chimiques.</p>	<p>Construire un diagramme isobare d'équilibre entre phases d'un mélange binaire à partir d'informations relatives aux courbes d'analyse thermique.</p> <p>Décrire les caractéristiques des mélanges homoazéotropes, hétéroazéotropes.</p> <p>Exploiter les diagrammes isobares d'équilibre entre phases, pour une composition en fraction molaire ou massique donnée :</p> <ul style="list-style-type: none"> - tracer l'allure de la courbe d'analyse thermique en indiquant le nombre de degrés de liberté du système sur chaque partie de la courbe ; - déterminer les températures de début et de fin de changement d'état ; - déterminer la composition des phases en présence à une température fixée ainsi que les quantités de matière ou les masses dans chaque phase. <p>Déterminer la solubilité d'une des espèces chimiques du système binaire dans l'autre à partir du diagramme binaire.</p>
<p>Distillations.</p>	<p>Interpréter une distillation simple, une hydrodistillation, une distillation fractionnée, à l'aide des diagrammes isobares d'équilibre liquide-vapeur.</p> <p>Mettre en œuvre une distillation fractionnée ou une hydrodistillation à la pression atmosphérique.</p>

cinétique PCSI

Notions et contenus	Capacités exigibles
<p>Cinétique en réacteur fermé de composition uniforme Vitesse volumiques 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).</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. 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. 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. 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 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. 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. 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>Relier la constante thermodynamique d'équilibre aux constantes de vitesse dans le cas d'une transformation modélisée par deux actes élémentaires opposés.</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.</p> <p>Reconnaître, 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>Reconnaître les paramètres qui favorisent la formation d'un produit dans le cas de deux réactions compétitives.</p> <p>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>Reconnaître un effet catalytique dans un mécanisme réactionnel ou sur un profil énergétique. Reconnaître 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>

atomistique PC

- chap B.1 - orbitales atomiques - classification périodique :

Notions et contenus	Capacités exigibles
Fonctions d'onde électroniques ψ de l'atome d'hydrogène. Nombres quantiques n, l, m_l, m_s . 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 hydrogénoides, 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 cœur 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.

chimie des solutions PCSI

- réactions acido-basiques, de précipitation et de dissolution :

Notions et contenus	Capacités exigibles
<p>Réactions acide-base</p> <ul style="list-style-type: none"> - constante d'acidité K_a ; constante d'acidité des deux couples de l'eau à 298 K. - diagramme de prédominance, de distribution ; - exemples usuels d'acides et bases : nom, formule et caractère – faible ou fort – des acides sulfurique, nitrique, chlorhydrique, phosphorique, acétique, du dioxyde de carbone aqueux, de la soude, la potasse, l'ion hydrogénocarbonate, l'ion carbonate, l'ammoniac ; - solutions tampons. <p>Réactions de dissolution ou de précipitation</p> <ul style="list-style-type: none"> - réaction de dissolution, constante de solubilité K_s ; - solubilité et condition de précipitation ; - domaine d'existence ; - facteurs influençant la solubilité. 	<p>Reconnaître une réaction acide-base à partir de son équation. Écrire l'équation de la réaction modélisant une transformation en solution aqueuse en tenant compte des caractéristiques du milieu réactionnel (nature des espèces chimiques en présence, pH) et des observations expérimentales. Utiliser des tables pour extraire les données thermodynamiques pertinentes pour étudier un système en solution aqueuse. Déterminer la valeur de la constante thermodynamique d'équilibre pour une équation de réaction, combinaison linéaire d'équations dont les constantes thermodynamiques sont connues. 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. Prévoir l'état de saturation ou de non saturation d'une solution. Utiliser les diagrammes de prédominance ou d'existence pour prévoir les espèces incompatibles ou la nature des espèces majoritaires. Retrouver les valeurs de constantes thermodynamiques d'équilibre par lecture de courbes de distribution et de diagrammes de prédominance (et réciproquement). Exploiter des courbes d'évolution de la solubilité d'un solide en fonction d'une variable. Capacité numérique : tracer, à l'aide d'un langage de programmation, le diagramme de distribution des espèces d'un ou plusieurs couple(s) acide-base, ou d'espèces impliquées dans une réaction de précipitation. Mettre en œuvre une réaction acide-base et une réaction de précipitation pour réaliser une analyse qualitative ou quantitative en solution aqueuse. Illustrer un procédé de retraitement ou de recyclage ou de séparation en solution aqueuse.</p>

atomistique PC

- chap B.1 - orbitales atomiques - classification périodique :

- chap B.2 - orbitales moléculaires et réactivité :

Notions et contenus	Capacités exigibles
<p>Construction des orbitales moléculaires</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"> - recouvrement ; - orbitales liante, antiliante, non liante ; - énergie d'une orbitale moléculaire ; - orbitale σ, orbitale π ; - représentation conventionnelle d'une orbitale moléculaire par schématisation graphique de la combinaison linéaire des orbitales atomiques. <p>Interaction d'orbitales de fragments.</p> <p>Diagramme d'orbitales moléculaires : occupation des niveaux, orbitales frontalières haute occupée et basse vacante, cas des entités radicalaires.</p> <p>Ordre de liaison dans les molécules diatomiques.</p>	<p>Identifier les conditions d'interaction de deux orbitales atomiques : recouvrement et critère énergétique.</p> <p>Construire des orbitales moléculaires de molécules diatomiques par interaction d'orbitales atomiques du même type (s-s, p-p).</p> <p>Reconnaître le caractère liant, antiliant, non liant d'une orbitale moléculaire à partir de sa représentation conventionnelle ou d'une surface d'iso-densité.</p> <p>Identifier la symétrie σ ou π d'une orbitale moléculaire à partir de sa représentation conventionnelle ou d'une surface d'iso-densité.</p> <p>Proposer une représentation conventionnelle d'une orbitale moléculaire tenant compte d'une éventuelle dissymétrie du système.</p> <p>Justifier la dissymétrie d'une orbitale moléculaire obtenue par interaction d'orbitales atomiques centrées sur des atomes d'éléments différents.</p> <p>Prévoir ou interpréter l'ordre énergétique des orbitales moléculaires et établir qualitativement un diagramme énergétique d'orbitales d'une molécule diatomique.</p> <p>Justifier l'existence d'interactions entre orbitales de fragment en termes de recouvrement ou d'écart d'énergie.</p>
	<p>Décrire l'occupation des niveaux d'un diagramme d'orbitales moléculaires.</p> <p>Identifier les orbitales frontalières à partir d'un diagramme d'orbitales moléculaires de valence fourni.</p> <p>Interpréter un diagramme d'orbitales moléculaires obtenu par interaction des orbitales de deux fragments, fournies.</p> <p>Relier, dans une molécule diatomique, l'évolution des caractéristiques de la liaison à l'évolution de l'ordre de liaison.</p>
<p>Prévision de la réactivité</p> <p>Approximation des orbitales frontalières.</p>	<p>Utiliser les orbitales frontalières pour prévoir la réactivité nucléophile ou électrophile d'une entité (molécule ou ion).</p> <p>Interpréter l'addition nucléophile sur le groupe carbonyle et la substitution nucléophile en termes d'interactions frontalières.</p> <p>Comparer la réactivité de deux entités à l'aide des orbitales frontalières.</p>

chimie des solutions PCSI

- réactions acido-basiques, de précipitation et de dissolution :

cf semaines 7 et 8

chimie des solutions PCSI

- réactions acido-basiques, de précipitation et de dissolution :

cf semaines 7 et 8

- la priorité sera donnée sur cette colle à la chimie des solutions : d'abord un exo de chimie des solutions PCSI (sauf rédox), puis ensuite, un exo d'atomistique de PC (chap B.3)

atomistique PC

- chap B.1 - orbitales atomiques - classification périodique :

- chap B.2 - orbitales moléculaires et réactivité :

- chap B.3 - structure orbitale des complexes :

Notions et contenus	Capacités exigibles
Structure des complexes	Reconnaitre le(s) site(s) de coordination d'un ligand à partir d'un schéma de Lewis.
Modélisation de la liaison dans un complexe entre une entité du bloc <i>d</i> et un ligand σ -donneur intervenant par une seule orbitale.	Établir qualitativement le diagramme d'interaction entre une orbitale d'une entité du bloc <i>d</i> et une orbitale d'un ligand σ -donneur. Prévoir qualitativement l'influence de l'énergie de l'orbitale de l'entité du bloc <i>d</i> sur la stabilisation des électrons du ligand par la complexation.
Ligands π -donneurs et π -accepteurs. Coordination des systèmes π non délocalisés.	Reconnaitre un ligand ayant des effets π à partir de la donnée de ses orbitales de valence. Identifier les interactions orbitales principales entre une entité du bloc <i>d</i> et un alcène, le monoxyde de carbone et le dihydrogène. Interpréter la modification de réactivité d'un alcène, du monoxyde de carbone et du dihydrogène par les phénomènes électroniques mis en jeu lors de leur coordination.