

Programme de colle Semaine 9
Du 24/11 au 29/11

Révisions de première année :

- Chimie organique : toute la PCSI + toute la PC

Un exercice pourra vous être donné.

TP Allantoïne

- Savoir expliquer en quoi consiste la recristallisation. Discuter du solvant le plus adapté.
- Savoir expliquer la différence entre un essorage et une filtration.

TP calorimétrie

- Savoir expliquer le calcul de la masse équivalente en eau d'un calorimètre
 - Savoir retrouver la valeur de l'enthalpie standard de réaction
 - Être capable d'expliquer un programme Monte Carlo
 - Zscore : utilité et façon de le calculer.
-

TM3 : Exercices uniquement

Introduction	3
I- Critère d'évolution d'un système siège d'une réaction chimique	3
A. Le sens d'évolution est connu grâce à l'enthalpie libre de réaction $\Delta_r G$	3
1. G est un potentiel thermodynamique à T et P constants, $dG \leq 0$	3
2. $dG = \Delta_r G d\xi$ à T, P constants	3
3. $\Delta_r G d\xi \leq 0$: l'évolution d'un système dépend du signe de $\Delta_r G$ car	4
4. Condition d'équilibre d'un système $\Delta_r G = 0$	4
5. Approche graphique de $\Delta_r G d\xi \leq 0$	4
B. Calcul de $\Delta_r G(T)$ à T fixée	5
1. Formule générale : $\Delta_r G = \Delta_r G^\circ + RT \ln(Q_r)$	5
2. On détermine $\Delta_r G^\circ = \Delta_r H^\circ - T \Delta_r S^\circ$	5
3. On sait que : $\Delta_r H^\circ(T) = \text{constante} = \sum \nu_i \Delta_f H^\circ_i(T)$	6
4. $\Delta_r S^\circ$ est calculée avec $\sum \nu_i S^\circ_{m,i}(T)$	6
C. Influence de la température sur $\Delta_r G^\circ(T)$	7
1. Signe de $\Delta_r G^\circ$: réaction endergonique ou exergonique	7
2. Approximation d'Ellingham : $\Delta_r G^\circ(T) = \Delta_r H^\circ(298\text{ K}) - T \Delta_r S^\circ(298\text{ K})$	7
3. Température d'inversion T_i : changement de signe de $\Delta_r G^\circ$	8
4. Lorsque le changement de température provoque un changement d'état	8
D. Synthèse de la méthode pour prédire le sens d'évolution d'un système chimique	8
1. Calculer $\Delta_r G^\circ$ puis Q_r pour connaître le signe de $\Delta_r G$ dans $\Delta_r G d\xi < 0$	8
2. Lien avec la règle d'évolution en comparant Q_r à K°	9
II- Étude d'un équilibre physico-chimique	10
A. Détermination de la constante thermodynamique d'équilibre $K^\circ(T)$	10
1. Détermination de $K^\circ(T)$ à partir de calcul du $\Delta_r G^\circ(T)$	10
2. Détermination de $K^\circ(T)$ à partir d'autres $K^\circ_i(T)$	11
3. Détermination de $K^\circ(T_1)$ à partir de $K^\circ(T_2)$	11
B. Distinction entre équilibre chimique et transformation totale	12
1. Avancement à l'équilibre ξ_{eq} et avancement maximal ξ_{max}	12
2. Détermination de ξ_{eq} par la loi de Guldberg et Waage	13
3. Détermination de ξ_{max} par d'un tableau d'avancement	13
4. Comparer ξ_{eq} et ξ_{max} pour savoir si la transformation est totale ou si le système est à l'équilibre	13

--	
C. Variation des fonctions thermodynamiques au cours de la transformation à T, P constants	14
1. Variation d'enthalpie ΔH , lien avec le transfert thermique	14
2. Variation d'enthalpie libre ΔG	14
3. Entropie créée S_c	14

4. Variation d'entropie	15
III- Paramètres influençant la position d'un équilibre	15
A. Variance d'un système physico-chimique à l'équilibre : $v = X - Y$	15
B. Cas de diminution de la variance	17
1. Par des conditions supplémentaires imposées au système	17
2. Par une variable de description qui n'est pas un facteur d'équilibre	17
IV- Optimisation d'un procédé physico-chimique : exemple du procédé Haber-Bosch	18
A. Méthode d'optimisation	18
1. Optimiser une synthèse industrielle : généralités	18
2. Optimiser le rendement en regardant l'influence d'un paramètre intensif	19
3. Synthèse du procédé Haber-Bosch : $v = 3$	19
B. Influence de la température	19
1. Résultats expérimentaux et interprétation	19
2. Démonstration	20
3. Calcul de la température d'inversion	20
4. Cas général pour l'influence de la température sur une réaction	20
C. Influence de la pression	21
1. Résultats expérimentaux	21
2. Démonstration	21
3. Cas général pour l'influence de la pression sur une réaction : principe de Le Chatelier	21
D. Optimisation du mélange initial des réactifs	22
1. Influence des gaz inertes ou des impuretés	22
2. Influence des proportions initiales de réactifs	23

Cours TM4 : Cours + Exercices

Introduction	3
I - D'un procédé de laboratoire à un procédé industriel	4
A- Opérations unitaires	4
B- Réacteurs continus et discontinus	5
1. Réacteurs fermés	5
a. Définition	5
b. Avancement et taux de conversion	5
2. Réacteurs ouverts	5
a. Réacteur continu parfaitement agité (RCPA)	5
b. Réacteur Piston (RP)	5
3. Etude des flux de matières dans les réacteurs ouverts	6
a. Débit massique $D_{m,A}$ et débit molaire D_A associée à l'espèce A	6
b. Débit massique global D_m et débit molaire global D	6
c. Conservation du débit massique (global) D_m	6
d. Pas de conservation du débit molaire (global) D	7
e. Débit volumique D_v : définition et hypothèse d'étude nécessaires à son utilisation	7
f. Lien entre débit volumique et débit massique :	7
g. Lien entre débit volumique D_v et débit molaire d'une espèce D_A	8
h. Tableau d'avancement en débit molaire	8
II- Cinétique des transformations en réacteur ouvert	10
A- Réacteur continu parfaitement agité (RCPA)	10
1. Rappel des hypothèses du modèle	10
2. Bilan de matière pour un réacteur RCPA	10
a. En régime stationnaire : $dn(\text{entrée}) - dn(\text{sortie}) + dn(\text{réaction}) = 0$	10
b. Autre expression du bilan de matière : $[R\acute{e}a\acute{c}t\acute{i}f](\text{entrée}) = [R\acute{e}a\acute{c}t\acute{i}f](\text{sortie}) + \tau$ $V/\text{Débit-volumique}$	11
c. Temps de passage $\tau = V/\text{Débit-volumique}$	11
d. Pour une loi de vitesse d'ordre 1 par rapport au réactif A : $[A](\text{sortie}) = [A](\text{entrée})/(1+k\tau)$	11
3. Dimensionnement du réacteur RCPA	12
a. Relier le taux de conversion du réactif au temps de passage $\alpha = k\tau/(1+k\tau)$	12
b. Estimer le volume du réacteur pour un débit volumique donné	13
4. Effet de la température	13
B- Réacteur piston (RP)	14
1. Réacteur Piston	14
2. Dimensionnement du réacteur piston	16
a. Relier le taux de conversion du réactif au temps de passage	16
b. Estimer le volume du réacteur pour un débit volumique donné	16
C- Comparaison des deux réacteurs	17
III- Étude thermique d'un réacteur continu parfaitement agité	18
A- Premier principe de la thermodynamique en système ouvert – Bilan énergétique	18
B- Point de fonctionnement lors d'une transformation adiabatique	20
C- Fonctionnement en présence d'un flux thermique	23

Quantique Q1 : Cours + Exercices proches du cours

Introduction.....	2
I- Description quantique de l'électron.....	2
A- Introduction à la mécanique quantique.....	2
1. La catastrophe ultraviolette.....	2
2. La nature ondulatoire de la lumière.....	2
3. Modèle de l'atome.....	3
B- Principe d'incertitude de Heisenberg.....	4
C- Notion de fonction d'onde.....	4
1. Définition.....	4
2. Interprétation physique de la fonction d'onde.....	5
3. Condition de normalisation pour la fonction d'onde :.....	5
4. Equation de schrödinger.....	5
II- Étude quantique de l'atome d'hydrogène et des ions hydrogénoïdes.....	6
A- Orbitales atomiques.....	6
B- Nombres quantiques.....	8
1. Nombre quantique principal n.....	8
2. Nombre quantique secondaire (ou azimutal) l.....	8
3. Nombre quantique magnétique orbital ml.....	8
4. Nombre quantique magnétique de spin ms.....	9
C- Partie radiale de la fonction d'onde et rayon orbitaire.....	10
D- Représentation standard de la partie angulaire de la fonction d'onde.....	10
III- Orbitales atomiques des atomes polyélectroniques.....	12
A- Complexité du problème et approximations.....	13
1. Prendre en compte l'ensemble des interactions rend impossible la résolution de l'équation de schrödinger.....	13
2. Approximation monoélectronique.....	13
3. Approximation de Slater.....	13
4. Évolution de la charge effective dans la classification périodique :.....	14
B- Orbitales de Slater.....	15
C- Configuration électronique fondamentale d'un atome et d'un ion.....	16
1. Principe d'exclusion de Pauli :.....	16
2. Règle de Klechkowski :.....	16
3. Méthode pour établir la configuration d'un atome ou d'un ion à l'état fondamental.....	16
4. Électron de coeur et de valence.....	17
5. Règle de Hund.....	17