

Programme de colle Semaine 10  
Du 1/12 au 5/12

**Révisions de première année :** Chimie organique : toute la PCSI + toute la PC

**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.

**TP :** détermination de grandeurs thermodynamiques

- Méthode Monte Carlo
  - Méthode de validation d'une régression linéaire
- 

**Cours TM4 : Exercices uniquement**

<b>Introduction</b>	<b>3</b>
<b>I - D'un procédé de laboratoire à un procédé industriel</b>	<b>4</b>
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
<b>II- Cinétique des transformations en réacteur ouvert</b>	<b>10</b>
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 : $[R\acute{e}a\acute{c}t\acute{i}f](\text{entrée}) = [R\acute{e}a\acute{c}t\acute{i}f](\text{sortie}) + r$ $V/\text{Débit-volumique}$	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
<b>III- Étude thermique d'un réacteur continu parfaitement agité</b>	<b>18</b>
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

<b>Introduction.....</b>	<b>2</b>
<b>I- Description quantique de l'électron.....</b>	<b>2</b>
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
<b>II- Étude quantique de l'atome d'hydrogène et des ions hydrogénoïdes.....</b>	<b>6</b>
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
<b>III- Orbitales atomiques des atomes polyélectroniques.....</b>	<b>12</b>
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

**I- Approximations fondamentales.....**

- A- Approximation de Born-Oppenheimer.....
- B- Approximation monoélectronique.....
- C- Méthode CLOA.....

**II- Diagramme d'OM d'espèces diatomiques de la première période.....**

- A. Interaction de deux orbitales atomiques de même nature : exemple de la molécule  $H_2$ .....
  - 1. Position du problème.....
  - 2. Diagramme d'orbitales moléculaires obtenu pour la molécule de dihydrogène.....
  - 3. Règles qualitatives simples déduites de ce diagramme.....
  - 4. Représentation graphique conventionnelle des orbitales moléculaires.....
- B. Configuration électronique et ordre de liaison.....
  - 1. Règles de remplissage :.....
  - 2. Indice de liaison.....
- C. Cas d'un diagramme hétéronucléaire :  $HHe^+$  d'espèces hétéronucléaires : analogie avec les espèces déduites.....
  - 1. Position du problème.....
  - 2. Diagramme d'OM de  $HHe^+$ , calculé par ordinateur.....
  - 3. Règles qualitatives simples qui peuvent-être déduites de ce diagramme.....
  - 4. Analyse du diagramme d'OM :.....

**III- Diagramme d'OM d'espèces diatomiques de la deuxième période.....**

- A- Principe de construction du diagramme d'OM pour les molécules homonucléaires : exemple du dioxygène.....
  - 1. Choix des orbitales atomiques à considérer pour la construction des OM du dioxygène :.....
  - 2. Diagramme d'OM de  $O_2$ , calculé par ordinateur.....
  - 3. Représentation graphique conventionnelle des orbitales moléculaires pour la molécule de dioxygène.....
  - 4. Raisonnement pour savoir si deux orbitales atomiques se recouvrent.....