

Programme pour la semaine du 06/11/17 au 10/11/17

Thermodynamique chimique

Affinité chimique : définition, expression en fonction de la constante thermodynamique $K^\circ(T)$ et du quotient Q de la réaction $\mathcal{A} = RT \cdot \ln(K^\circ(T)/Q)$. Critère d'évolution spontanée et signature de l'équilibre (relation de De Donder).

Etude de l'équilibre : relation de Guldberg et Waage ou Loi d'action des masses $K^\circ(T) = Q_{\text{eq}}$. Etude du système hors équilibre selon le signe de \mathcal{A} , notion de rupture d'équilibre.

Nombreux exemples. Etude de l'évolution de la réaction chimique à T, P constants : lien avec l'étude graphique de $G(\xi)$ (G minimal à l'équilibre). Calcul de ΔG et ΔS en exercice.

Notion de variance et de facteurs d'équilibre, calcul sur un exemple.

Déplacement d'équilibre : généralités et loi expérimentale de modération de Le Châtelier, variation de $K^\circ(T)$ selon la température. Effet sur l'équilibre de la modification infinitésimale des facteurs d'équilibre suivants : T (loi de Van't Hoff), P (loi de Le Châtelier). Evolution du quotient sur l'exemple de l'ajout infinitésimal d'un constituant physico-chimique (actif ou inactif) à T constant, incidence sur le déplacement de l'équilibre.

Tout exercice.

Les orbitales atomiques

Présentation de la fonction d'onde $\chi(r, \theta, \varphi)$, densité de probabilité et normalisation.

Cas de l'hydrogénoïde : présentation des solutions exactes sous la forme

$$\chi_{n,\ell,m\ell}(r, \theta, \varphi) = R_{n,\ell}(r) \times Y_{\ell,m\ell}(\theta, \varphi)$$

Analyse de R , étude de la densité radiale de probabilité et rayon de l'orbitale atomique.

Représentation de la forme associée à Y^2 .

Représentation conventionnelle, étude des symétries : notion de phase et de plan nodal.

Révisions de première année

- Atomistique : configuration électronique d'un atome (règles associées), le tableau périodique.

- Etude d'une molécule : théorie de Lewis / VSEPR / mésomérie

- Réactions de chimie organique : chimie des dérivés halogénés et mécanismes $S_N 1$ et 2 et éliminations.