

Programme de la semaine précédente :

Description thermodynamique d'un système physico chimique

- **Grandeurs de réaction** : définition / Cas de la fonction $\Delta_r G$; relation avec les potentiels chimiques
- Grandeurs standard de réaction : définition / influence de T , approximation d'Ellingham / relations entre $\Delta_r X^\circ$
- Grandeurs standard de réaction tabulées : $\Delta_f H^\circ$, $\Delta_{diss} H^\circ$, règle de Hess
- Calculs de $\Delta_r H^\circ$, cycles thermodynamiques

Structure de l'atome - les pre- requis

- Composition du noyau , caractéristiques d'un proton , d'un neutron , d'un électron
- Symbole d'un atome : A et Z
- Isotopes
- Transformations nucléaires

+

Modèle quantique de l'atome

- 1) Détermination des OA dans le cadre de la mécanique quantique : densité de probabilité de présence
Résultats pour l'atome d'hydrogène , nombres quantiques (n , l , m) , expression générale sous la forme $R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, expression de l'énergie , $E(n)$
Résultats pour les espèces hydrogénoïdes
Résultats pour les atomes polyélectroniques : **approximation orbitale (Z_{eff})** , $E(n, l)$
Notion de rayon d'une orbitale , fonction densité radiale de probabilité de présence
Notion de région nodale , de phase , de plans de symétrie et d'antisymétrie .
Représentations conventionnelles des OA s et p
- 2) Application : CEF d'un atome : principe d'exclusion de Pauli , règle de Klechkowski , règle de Hund
L'écriture d'une CEF doit être maîtrisée et les règles doivent être énoncées de façon intelligible
Electrons de valence et de cœur

Programme 2^{ème} année

Enthalpie de réaction, entropie de réaction, enthalpie libre de réaction ; grandeurs standard associées.	Justifier qualitativement ou prévoir le signe de l'entropie standard de réaction. Déterminer une grandeur standard de réaction à l'aide de données thermodynamiques et de la loi de Hess.
--	--

Notions et contenus	Capacités exigibles
Fonctions d'onde électroniques ψ de l'atome d'hydrogène. Nombres quantiques n, l, ml, ms. 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 hydrogénoïdes, 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 (pas encore vu pour les ions) Électrons de coeur 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.	Relier qualitativement le rayon associé à une orbitale atomique à la charge effective.