

1. Construction des OM dans le cadre du modèle CLOA :

savoir énoncer les approximations du modèle , les conditions d'interaction de deux OA , tracer un diagramme d'interaction entre deux AO et identifier la symétrie σ ou π

2. Thermodynamique chimique : programme de la semaine 7 avec en plus le calcul du nombre de degrés de liberté et les déplacements d'équilibre .**Evolution des systèmes physico-chimiques**

- **Transfert thermique** lors d'une transformation chimique réalisée à T et P fixées
- Température maximale atteinte lors d'une transformation chimique adiabatique , monobare , monotherme
- **Conditions d'évolution et d'équilibre pour un système chimique** siège d'une ou plusieurs réactions
- **L'état d'équilibre**
 - Relations de définition d'une constante d'équilibre
 - Expression de la constante d'équilibre
 - Calcul d'une constante d'équilibre
- **T facteur d'équilibre**
 - Relation de Van't Hoff , effet d'une variation de température et optimisation , (*température d'inversion*)
- **P facteur d'équilibre**

Influence de P à savoir démontrer sans utiliser la règle de Le Chatelier (raisonnement sur $\Delta_r G$ attendu)

- Optimisation d'un procédé chimique , déplacement et rupture d'équilibre

(La justification nécessite de présenter un raisonnement basé sur $\Delta_r G$)

-variance et nombre de degrés de liberté : définitions , calculs (N-R) , signification

► Retour sur les diagrammes binaires : nombre de degrés de liberté sur les différentes parties d'une courbe d'analyse thermique

Programme 2^{ème} année

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. Déterminer une enthalpie standard de réaction .
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. Relation entre enthalpie libre de réaction, constante thermodynamique d'équilibre et quotient de réaction	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 physicochimique dans un état donné à l'aide de l'enthalpie libre 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
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.
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