

4CI201 Du microscopique au macroscopique									
Mots clés : interactions intermoléculaires, thermodynamique statistique, entropie, équilibre, irréversibilité, diffusion, états de la matière, interfaces									
Responsable Virginie Marry, Professeur, UMR Physicochimie des Electrolytes et Nanosystèmes Interfaciaux, Sorbonne Université									
ECTS 6	Cours 20	TD 40	TP	Tutorat	Ecrit 50	CC 50	TP	Oral	Eval. répartie non
<p><i>Descriptif de l'UE</i></p> <p>Le but de cette U.E. est de montrer comment les propriétés physico-chimiques de la matière à l'échelle macroscopique émergent de sa nature microscopique (atomes, molécules etc.) et du très grand nombre de particules qui la constitue (de l'ordre du nombre d'Avogadro). Pour cela, les outils de thermodynamique statistique seront présentés et appliqués à des phénomènes rencontrés en Licence : équilibre, évolution vers l'équilibre, cinétique, transformations physico-chimiques, miscibilité, spectroscopie, adsorption. On montrera comment ces outils et concepts permettent d'interpréter ces phénomènes macroscopiques et les grandeurs thermodynamiques macroscopiques classiques, pour ensuite mieux les maîtriser. Ainsi l'UE permettra aux étudiants de rassembler des visions souvent compartimentées de la chimie (par type de systèmes ou de techniques expérimentales) grâce à une représentation unique de la matière.</p> <p><i>Objectifs d'apprentissage</i></p> <p>A terme de l'U.E., l'étudiant sera capable de relier les propriétés macroscopiques de la matière aux propriétés à l'échelle moléculaire et de mobiliser ces notions pour analyser et interpréter des phénomènes physico-chimiques simples et identifier les paramètres les influençant.</p> <p><i>Prérequis</i></p> <p>L'étudiant doit être capable d'appliquer les concepts de thermodynamique chimique niveau licence (principes, énergie libre, enthalpie, évolution, équilibres) aux réactions physico-chimiques. Des notions d'électrostatique, de mécanique et de mathématiques sont requises (niveau terminale / L1).</p>									
<i>Langue⁽¹⁾</i>	Cours, TD, TP Cours : amphi en français ou video sous titrée en anglais TD et TP : groupes anglophone ou francophones Les sujets d'examen pourront être rédigés en anglais s'il y a des étudiants non francophones							<i>Documents</i> français et/ou anglais	<i>Bibliographie</i> français et/ou anglais

Fonctionnement de l'UE

L'UE sera découpée en 2h de cours et 4h de travaux dirigés par semaine, afin de permettre une meilleure assimilation du cours et une mise en application des concepts.

Deux séances de travaux dirigés seront effectuées sur ordinateurs à l'UTES.

Le plan de l'UE est le suivant :

- **Introduction** : mise en évidence de l'importance de la description microscopique, loi des grands nombres
- **Observations macroscopiques** : notion de grandeur moyenne, de probabilité et d'irréversibilité
 - Distribution de particules dans deux compartiments – configuration la plus probable – fluctuations
 - Notion d'irréversibilité : évolution vers la configuration la plus probable (film de l'expansion d'un gaz)
- **Description particulière de la matière**
 - Principe d'équiprobabilité, nombre d'états accessibles, entropie
 - Distribution de Boltzmann et fonction de partition particulière

Chimie

- Applications : spectroscopie (vibrationnelle, RMN)
- Equation d'état : gaz parfait, gaz de van der Waals

- **Systèmes en contact : équilibre et évolution vers l'équilibre**
 - Condition d'équilibre entre deux systèmes : égalité des températures, des pressions et des potentiels chimiques selon les conditions

- **Systèmes de particules en interaction : applications aux liquides**
 - Description des liquides simples : Changement d'état, constante diélectrique, tension de surface
 - Lois capillaires
 - Mélanges : solutions idéales et régulières
 - Solutés hydrophobes
 - Solutés ioniques, théorie de Debye Hückel

- **Systèmes complexes**
 - Dispersions, stabilité colloïdale par le modèle de DLVO
 - Solution d'amphiphiles, micelles
 - Adsorption sur une surface, isotherme de Langmuir

4CI201 From microscopic to macroscopic																		
Keywords: intermolecular interactions, statistical thermodynamics, entropy, equilibrium, irreversibility, diffusion, states of matter, interfaces																		
Responsable: Virginie Marry, Professeur, UMR Physicochimie des Electrolytes et Nanosystèmes Interfaciaux, Sorbonne Université																		
ECTS 6	lecture 20	exercices 40			Exam 50	CC 50	TP	Oral	Eval. répartie non									
<p><i>Description</i></p> <p>The aim of this course is to show how the physico-chemical properties of matter at the macroscopic scale emerge from its microscopic nature (atoms, molecules, etc.) and from the very large number of particles that constitute it (of the order of Avogadro's number). For this, the tools of statistical thermodynamics will be presented and applied to phenomena encountered in the Bachelor's degree: equilibrium, evolution towards equilibrium, kinetics, physicochemical transformations, miscibility, spectroscopy, adsorption. We will show how these tools and concepts allow us to interpret these macroscopic phenomena and the classical macroscopic thermodynamic quantities, in order to better master them. Thus, the course will allow students to bring together often compartmentalized views of chemistry (by type of system or experimental techniques) through a single representation of matter.</p>																		
<p><i>Learning objectives</i></p> <p>At the end of the course, the student will be able to link the macroscopic properties of matter to properties at the molecular level and to mobilize these notions to analyze and interpret simple physicochemical phenomena and to identify the parameters influencing them.</p>																		
<p><i>Prerequisites</i></p> <p>The student must be able to apply the concepts of chemical thermodynamics at the undergraduate level (principles, free energy, enthalpy, evolution, equilibria) to physical-chemical reactions. Notions of electrostatics, mechanics and mathematics are required (level high school / L1).</p>																		
<p><i>Langue⁽¹⁾</i></p> <table border="1"> <tr> <td>Classes: lecture in French or videos with English subtitles</td> <td><i>Documents</i> French/ English</td> <td><i>Bibliography</i> French/ English</td> </tr> <tr> <td>Exercising class: English or French speaking groups</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>Exam subjects may be written in English</td> <td></td> <td></td> </tr> </table>										Classes: lecture in French or videos with English subtitles	<i>Documents</i> French/ English	<i>Bibliography</i> French/ English	Exercising class: English or French speaking groups			Exam subjects may be written in English		
Classes: lecture in French or videos with English subtitles	<i>Documents</i> French/ English	<i>Bibliography</i> French/ English																
Exercising class: English or French speaking groups																		
Exam subjects may be written in English																		

Organisation

The course will be divided into 2 hours of lectures and 4 hours of tutorials per week, in order to allow a better assimilation of the course and an application of the concepts.

Two sessions of tutorials will be done on computers at the UTES.

The plan of the UE is as follows:

- **Introduction:** emphasis on the importance of microscopic description, law of large numbers
- **Macroscopic observations:** notion of average size, probability and irreversibility
 - Distribution of particles in two compartments - most probable configuration - fluctuations
 - Notion of irreversibility: evolution towards the most probable configuration (film of the expansion of a gas)
- **Particle description of matter**
 - Principle of equiprobability, number of accessible states, entropy
 - Boltzmann distribution and particle partition function
 - Applications: spectroscopy (vibrational, NMR)

Chimie

- o Equation of state: perfect gas, van der Waals gas
- **Systems in contact:** equilibrium and evolution towards equilibrium
 - o Equilibrium condition between two systems: equality of temperatures, pressures and chemical potentials according to the conditions
- **Systems of interacting particles:** applications to liquids
 - o Description of simple liquids: change of state, dielectric constant, surface tension
 - o Capillary laws
 - o Mixtures: ideal and regular solutions
 - o Hydrophobic solutes
 - o Ionic solutes, Debye Hückel theory
- **Complex systems**
 - o Dispersions, colloidal stability by the DLVO model
 - o Amphiphilic solutions, micelles
 - o Adsorption on a surface, Langmuir isotherm