

Titre.

- Cotutelle Canada - France.
 - Chimie
 - Physique

Plan

Parcours, Enseignement, Diffusion scientifique

SUTÉ = Biologie

SESI = Sciences exactes.

Contrat PRREL: regional
module L₁

- notation scientifique
- incertitude
- présentat^o résultat
(graph)

Physique Itinérante : pendant ATER

Contexte et Problématique.

- Collaboration avec IRSN Institut de Radioprotection et sûreté nucléaire
- Accidents possibles.
 - rupture de confinement - ou autre acc grave
 - Feu de réacteur
 - ↳ celui qui nous intéresse

Radio et chimio toxicité Pu.

COMBUSTIBLE

- Notera que il peut être stocké ou réutilisé par la recharge

Radiotoxicité

- Echelle logarithmique

Catalyseur à l'uranium

- Utiliser l'U appauvri

Problématique

- Actinides difficile à manipuler.
 - tps de vie : pour les autres pas ceux là
 - toxicité (radio & chimio)
 - Pu manipulés uniquement à Marcoul CEA à côté d'Avignon

Oxyde de Pu

- config elec
- Enthalpie de formation.
- Minimiser les erreurs.

Catalyseur

- modéliser la liaison pour la comprendre



comprendre le fct^o du catal.

Mise en perspective didactique

- mettre en rouge le gel même de la 9^e.

1- Cinétique

p14 exp de cinétique vu au lycée -
ensuite on leur présente une vision macro
avec par exp une couleur qui apparaît au desop.

p15 Post bas → vision microscopique de coord react^o

mais avant de détailler : qu'est-ce qu'une coord
de react^o?

Ep on ds la tête de l'élève

Coord. de reaction: coordonnée monodim abstraite qui
représente l'évo d'un processus
chimique le long d'un chemin de
reaction

→ tjrs un paramètre géométrique (± complexe)

ici distance entre [^]benzène et métal
centre

③

Pk Th & Zr.

Th: équivalent acsf vides. et facile à manip.

Zr: Pas de f du tt. (ni 4f ni 5). $6d^2 7s^2$
 $4d^2 5s^2$.

Ac coord de réaction et énergie relative.

=> reproduire la tendance.

dist Zr < dist Th < dist U.

=> on voit env où est le min

=> gagner du temps par l'optimisat°.

en effet ~300 de gre de liberté

ms 1 liaison qui représente bien la réact°

=> OK pr coord de réact°.

État de Transition

non isolable ms cara en théorie.

p19 ac profil react° nulle on veut regarder si SN_1 ou SN_2

p20 m optimisat° de ET $\Rightarrow$ fuq im selon O-C-CE

$\Rightarrow$ on trouve le coord de react°

p21 : on peut modéliser les SN_1 & SN_2 et voir

que $E_a(SN_2) < E_a(SN_1)$ de

SN_2 préférable

Organométallique

- Similitude entre cata & ferrocène

A p. du ferro on va essayer de comprendre les résultats
en prenant  $\downarrow$ cyclopentadiényl.

- OM. ferrocène

$\rightarrow$ zoom sur les orb d_x ac ferrocène penta-
du fer

ensuite on remplace le cyclopentadiényl par benzène

$\rightarrow$ OM.

maintenant que bien compris on regarde benzène



avec orb f

p 26: par sym ok on voit que ça marche

C_{6v} .

ms est-ce que ça fonctionne au niveau de l'écart énergétique ? oui

p 27: Déformation de densité

expliquer tranquillement

⚠ pas une orbital mais résultat des contribut°

$$\rho = \rho^{\text{sys}} - \sum_i \rho_i^{\text{frag}}(r)$$

densité syst
tot

densité de frag

densité du jaune vers le vert

on voit une donnat° ms pas de rétrodonation

3 - Thermochimie - Calcul d'enthalpie de formation

Rappel donné à OK et en phase gaz.

$\neq$ react° pr $\oplus$ precus.

Calcul de $\Delta_r H^\circ$ très simple pouvant être donné à 2^{ème} année licence ou PC.

P. 29

Lire $\oplus$ Etat de référence -

Ref classique.	Ref théorique.
GP. $\Delta_f H^\circ = 0$ (pr O_2) par choix.	GP $\neq$ atome et e^- éloigné à l'infini et leur posit° actuelle.

$\rightarrow$ Pas un pb car on fait une diff d'énergie ds tt les cas.

p 30.

Plutôt OK

Diminuer l'erreur.

$\Rightarrow$ faire des calculs sur $\neq$ réaction

Incertitude de type A.

• traitement statistique moyenne + écart type

⚠ couplé type A + B hors programme

⇒ découplé voir

Incertitude de type B.

Pas d'incertitude O_2 car pas d'erreur (ref car O_2 gaz de l'état standard).

$\Delta E_i = 0$ car on a fait un effort de calcul pour avoir $\Delta E_i \approx 0$.

Rappel: erreur $\neq$ valeur vraie (on n'en doit pas dire ça)

et valeur donnée

incertitude évaluation de l'erreur.

Épreuves orales.

Accompagner.

TIPE:

Accompagne.

Particulièrement puisque codé pendant
ma thèse scripte Inretem⁺ donné
⊕ inclusion ZORA ds Horton.

Conclusion.

Plurisciplinarité PhD Phys & Chimie
 /
 enseignem^t parcours.

Connaissance des difficultés de l'élève

- en amont didactique ds construct^o (exp rap de math)
 pédagogie durant
- en aval remédiat^o (svt en cours particulier)

Notes supplémentaires

th. chp cristallin : chp fort / faible.

th orbitallaire : donat° / retrodo

Calculer ρ_{OCV} .

deformation de densité: $\Delta \rho(r)$

$$\Delta \rho(r) = \rho^{sys} - \sum_i \rho_i^{frag}(r)$$

/
calcul sur
tout le
sys.

obtenue ac
les orbitales
des frag.