Licence de Chimie - L2
Unité d'enseignement LU2CI037
MATHEMATIQUES ET PHYSIQUE POUR LA CHIMIE
Sorbonne Université - Année 2020-2021

Examen du 18 janvier 2021
Durée de l'épreuve : 1 heure 30

Exercice I Mathématiques :

Un réacteur nucléaire génère de l'énergie (sous forme de chaleur) grâce à la fission contrôlée des noyaux d'uranium constituant les "barres de combustible" (barres cylindriques également appelées "crayons"). La chaleur est évacuée de manière radiale, par conduction thermique, vers un fluide "caloporteur" (de l'eau) afin d'alimenter un cycle moteur pour produire de l'électricité. La répartition de la température dans la barre de combustible est donnée par la loi suivante: $T(x, y, z) = A - B(x^2 + y^2)$, loi valable pour $0 \leq \sqrt{x^2 + y^2} \leq 0,015\,m$, et A et B des constantes valant respectivement $993\,K$ et $2 \times 10^4\,K.m^{-2}$. Le diamètre de la barre vaut $0,03\,m$ et son axe correspond à l'axe Oz (le tout dans un repère orthonormé $(O, \vec{\imath}, \vec{\jmath}, \vec{k})$).

1. Sachant que le vecteur flux thermique, $\vec{h}$, est défini par : $\vec{h} = -K\,\overrightarrow{grad}(T(x, y, z))$, donner les composantes de ce vecteur $\vec{h}$.
2. Exprimer la norme du vecteur $\vec{h}$ en fonction de x et y.
3. Que représente concrètement le gradient de $T(x, y, z)$.
4. Calculer la divergence $div(\vec{h})$.
5. En utilisant de manière appropriée $\vec{\nabla}$ réécrire $\overrightarrow{grad}(T(x, y, z))$ et $div(\vec{h})$.
6. La divergence de $\vec{h}$ peut s'écrire à l'aide d'un autre opérateur différentiel et de la fonction $T(x, y, z)$. Nommer et exprimer ce nouvel opérateur en fonction des dérivées partielles dans un repère $(O, \vec{\imath}, \vec{\jmath}, \vec{k})$ orthonormé.
7. La fonction $T(x, y, z)$ est-elle harmonique ? Justifiez votre réponse.

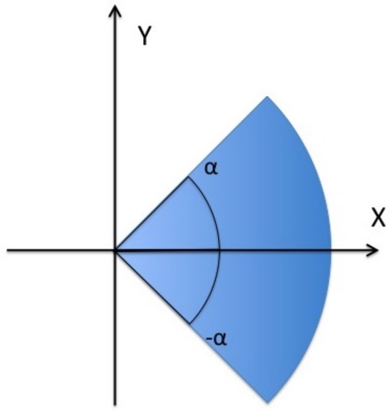
Exercice II Mathématiques : Coordonnées polaires et intégrales doubles

1. Rappeler les expressions des coordonnées cartésiennes x, y en fonction des coordonnées polaires r, θ.
2. Calculer les coordonnées cartésiennes des points A, B, C de coordonnées polaires $(1, \pi/2)$, $(2, \pi/4)$, $(3, \pi)$
3. Calculer le Jacobien correspondant aux dérivées de x, y par rapport à r, θ.
4. En déduire l'élément de surface pour une intégrale double en coordonnées polaires.
5. L'aire d'un disque peut se calculer à partir de l'intégrale double $\iint dS$. Calculer l'aire d'un disque de rayon R et centré sur l'origine $(0, 0)$.

6. Une part de galette des rois correspond à une portion d'un disque de rayon R et d'épaisseur e (dessin ce-dessous). Le barycentre de cette part de galette se situe sur l'axe X à la coordonnée x_G qui se calcule à partie de l'intégrale suivante:

$$x_G = \frac{1}{M} \iint x \times \rho \times e \times dS$$

où M est la masse de la portion de galette, ρ la masse volumique de la galette, e l'épaisseur de la portion.



   (a) Pourquoi l'emploi des coordonnées polaires est-il adapté à la résolution de ce problème ?
   (b) Calculer $M = \iint \rho \times e \times dS$ en fonction de ρ, e, R et α.
   (c) Calculer x_G en fonction de ρ, e, R et α

Exercice III Physique : Diffusion

Soit deux enceintes en forme de parallélépipède rectangle de section S et de volumes V_1 et V_2, remplies d'un solvant (eau) contenant un soluté (NaCl) et séparées par une membrane perméable aux solutés d'épaisseur e. Les concentrations respectives en solutés à $t = 0$ sont notées $C_1(0)$ et $C_2(0)$.

Données :

Le coefficient de diffusion du soluté (NaCl) dans la membrane vaut $D = 10^{-10} m^2\ s^{-1}$.

$S = 1\ m^2$, $V_1 = 0,5\ m^3$, $V_2 = 1,5\ m^3$, $C_1(0) = 0,5\ mMol\ L^{-1}$, $C_2(0) = 0,1\ mMol\ L^{-1}$, $e = 1\ mm$

1. **Instant initial :** $t = 0$

   (a) Faire un schéma des compartiments en faisant apparaitre les différentes valeurs numériques essentielles du problème.
   (b) Donner la direction du flux de soluté (1 vers 2 ou 2 vers 1).
   (c) Donner L'expression du vecteur densité de courant de soluté traversant la membrane (on prendra un vecteur unitaire $\vec{u}_r$ perpendiculaire à la surface de la membrane et orienté dans le sens du flux de soluté). Calculer sa norme en précisant l'unité.
   (d) Donner l'expression analytique du flux en fonction du vecteur densité de courant. Déduire de la question précédente la valeur du flux de soluté traversant la membrane à l 'instant initial ($t = 0$) en $mMol\, s^{-1}$.
   (e) Expliquer qualitativement comment évoluent les concentrations dans les deux compartiments. Quelle est la concentration finale (au bout d'un temps infini) dans les deux compartiments ?

2. **Instant t quelconque**

   (a) Exprimer le flux traversant la membrane à un instant t quelconque en fonction des concentrations instantanées $C_1(t),\ C_2(t)$ dans les deux compartiments.

   (b) En déduire l'évolution du nombre de solutés dans le compartiment 1 puis une équation différentielle impliquant $C_1(t)$ et $C_2(t)$

   (c) La conservation de la matière impose une relation simple entre $C_1(t),\ C_2(t)$, quelle est-elle ?

   (d) Montrer alors que $C_1(t)$ est solution d'une équation différentielle du premier ordre :

   $$\frac{dC_1(t)}{dt} + \frac{C_1(t)}{\tau} = \alpha$$

   où $\frac{1}{\tau} = \frac{D\ S}{e}\left(\frac{1}{V_1} + \frac{1}{V_2}\right)$, $\alpha = \frac{D\ S\ n_0}{e\ V_1\ V_2}$ et $n_0 = C_1(0)\ V_1 + C_2(0)\ V_2$

   (e) Résoudre cette équation et exprimer $C_1(t)$ en faisant apparaître les concentrations initiales $C_1(0)$ et $C_2(0)$ et les autres données du problème.

   (f) En déduire $C_2(t)$.

   (g) Représenter qualitativement l'allure des courbes représentant $C_1(0)$ et $C_2(0)$, vers quelles valeurs tendent les concentrations ?

Exercice IV Physique : Electrostatique

Dans la molécule de HF, l'électronégativité de l'atome de fluor lui confère une charge partielle négative $-\delta$. L'atome d'hydrogène porte alors une charge partielle postive $+\delta$. $\delta = \frac{q_e}{2}$, q_e étant la charge élémentaire. La distance entre les atomes H et F est $d = 1,7$ Å. L'axe passant par les centres des atomes H et F est pris comme axe (Ox), O étant à mi-distance entre H et F. Les abscisses de F et H sont alors respectivement : $x_F = -\frac{d}{2}$ et $x_H = \frac{d}{2}$

1. Exprimer le champ électrique à une position d'abscisse $x > \dfrac{d}{2}$ sur l'axe (Ox) dû à l'atome d'hydrogène H.

2. Exprimer le champ électrique à une position d'abscisse $x > \dfrac{d}{2}$ sur l'axe (Ox) dû à l'atome de fluor F.

3. Déduire des deux questions précédentes le champ électrique à une position d'abscisse $x > \dfrac{d}{2}$ sur l'axe (Ox) dû à la molécule HF.

4. Quelle est alors la force exercée sur une charge q placée à cette position ?

   Questions supplémentaires optionnelles (points bonus) :

5. On place une deuxième molécule HF à une position $D = 3$ Å: F en $x = D - \frac{d}{2}$ et H en $x = D + \frac{d}{2}$
   Faire un schéma représentant les deux molécules

6. Calculer alors la force exercée sur la deuxième molécule HF en supposant que la première molécule est maintenue fixe.

7. Cette force est-elle attractive ou répulsive ? La réponse était-elle évidente sans calcul ?

8. Quelle force subirait la molécule si les positions des atomes H et F étaient interchangées ?