

6.0 crédits	45.0 h + 15.0 h	1q
-------------	-----------------	----

Enseignants:	Debecker Damien ;
Langue d'enseignement:	Français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Préalables :	Chimie physique I. Mécanique des fluides (pour partim B)
Thèmes abordés :	<p>Mise en l'uvre de deux approches physico-chimiques complémentaires pour la prévision et la maîtrise des propriétés de la matière. PROPRIETES MACROSCOPIQUES ET INTERPRETATION MOLECULAIRE</p> <p>--</p> <p>CINETIQUE. Connaissance des lois fondamentales régissant le déroulement des réactions chimiques // Interprétation des données expérimentales de cinétique pour la déduction des mécanismes réactionnels.</p> <p>--</p> <p>EQUILIBRES DE PHASE. Etude des équilibres de phase des systèmes condensés (liquide/liquide ; liquide/solide) et des systèmes liquide/vapeur à plusieurs constituants : interprétation et utilisation des diagrammes d'équilibre entre phases // Etude thermodynamique des systèmes réels à plusieurs constituants (cas des solutions) : utilisation des outils thermodynamiques pour la résolution des problèmes d'équilibre de phase.</p> <p>PROPRIETES DES PARTICULES ET PREVISION DES PROPRIETES MACROSCOPIQUES</p> <p>--</p> <p>MECANIQUE STATISTIQUE. Les concepts de base // Application aux systèmes gazeux // Calcul a priori des grandeurs thermodynamiques // Application à l'énergie libre chimique // Notions de thermodynamique du non-équilibre.</p>
Acquis d'apprentissage	<p>a. Contribution de l'activité au référentiel AA (AA du programme)</p> <p>1.1, 1.2 2.1 4.2, 4.4</p> <p>b. Formulation spécifique pour cette activité des AA du programme (maximum 10)</p> <p>Au terme de cette activité, l'étudiant est capable de :</p> <p>--</p> <p>Quantifier, conceptualiser et modéliser les propriétés de la matière et sa transformation.</p> <p>--</p> <p>Définir précisément les concepts de vitesse de réaction, d'ordre cinétique, d'énergie d'activation, d'équilibre, de rendement, de sélectivité.</p> <p>--</p> <p>Analyser de manière graphique et/ou numérique des données cinétiques expérimentales de réactions simples, équilibrées, consécutives et parallèles, afin d'en extraire les lois cinétiques et de prédire le comportement des systèmes chimiques correspondants au-delà de l'expérience.</p> <p>--</p> <p>Expliquer et utiliser à bon escient les différents principes et lois décrivant la thermodynamique et la cinétique chimique, à la fois à l'échelle microscopique (molécules et atomes) et macroscopique (mole, phase).</p> <p>--</p> <p>Lire, analyser et exploiter des diagrammes de phase complexes représentant des systèmes multiphasiques, pour en extraire les informations qualitatives et quantitatives nécessaires à la résolution de problèmes pratiques.</p> <p>--</p> <p>Démontrer de manière formelle le lien entre la quantification des niveaux d'énergie des atomes et des molécules et le comportement thermodynamique macroscopique de ces composés, en exploitant les principes de la thermodynamique statistique.</p> <p><i>La contribution de cette UE au développement et à la maîtrise des compétences et acquis du (des) programme(s) est accessible à la fin de cette fiche, dans la partie « Programmes/formations proposant cette unité d'enseignement (UE) ».</i></p>
Modes d'évaluation des acquis des étudiants :	Examen écrit couvrant systématiquement l'ensemble des AA annoncés pour le cours (théorie et exercices).

<b>Méthodes d'enseignement :</b>	Cours magistral avec usage d'un powerpoint mis à disposition sur iCampus en début d'enseignement. Les diapositives sont utilisées comme support à l'exposé magistral mais une grande partie de l'information (explications, exemples, développements mathématiques, exemples chiffrés, visualisation de graphiques, etc.) est donnée oralement et au tableau pendant le cours. Des séances dirigées de résolution d'exercices sont organisées (TP).
<b>Contenu :</b>	Introduction Objectif du cours ' consignes pratiques ' information concernant l'examen Contexte du cours, articulation avec les prérequis et annonce des liens avec les cours suivants Cinétique chimique Vitesse de réaction (définitions). Relation avec la thermodynamique chimique (conservation de la matière, principe de Berthelot, principe de Matignon, principe de La Chatelier). Equations cinétiques des processus chimiques. Energie d'activation. Ordres de réactions. Ordres cinétiques des espèces. Dégénérescence des ordres cinétiques. Temps de demi-vie. Réactions simples. Réactions équilibrées. Méthodes de linéarisation. Influence de la température. Théorie des vitesses absolues des réactions. Réactions irréversibles et réversibles. Réactions parallèles. Réactions consécutives (compétitives et non compétitives). Exemple d'application des résultats d'études cinétiques. Théorie des collisions et du complexe activé. Cinétique des réactions catalytiques. Cinétique des réactions de formation des polymères. Polymérisation en chaîne. Polymérisation par étapes. Thermodynamique des systèmes multiphasiques Définition de « phase ». Diagramme de phase de l'eau. Relation de Clausius-Clapeyron. Règle des phases. Diagrammes de phase des systèmes liquide/liquide, liquide/solide et liquide/vapeur à plusieurs constituants. Thermodynamique des solutions idéales. Thermodynamique des solutions réelles (grandeurs molaires partielles, énergie libre du solvant et des solutés, détermination de l'activité des solutés à partir des propriétés du solvant). Utilisation des outils thermodynamiques pour l'étude des propriétés colligatives des solutions diluées (pression de vapeur, point d'ébullition, point de congélation et pression osmotique). Thermodynamique statistique Introduction, concepts de base et motivation. Energie du système vs. énergie moléculaire. Lien macro-micro. Hypothèse d'ergodicité, microétat, configuration, postulats de la thermodynamique statistique. Loi de Boltzmann et fonction de partition. Théorie cinétique et équation d'état des gaz. Calcul a priori des grandeurs thermodynamiques (énergie interne, enthalpie, énergie libre, entropie, chaleur molaire, pression). Participation des quatre contributions énergétiques (translation, rotation, vibration, mouvements électroniques) aux propriétés thermodynamiques. Application à l'équilibre chimique. Introduction à la thermodynamique du non-équilibre.
<b>Bibliographie :</b>	Aucun support payant n'est obligatoire. Une impression des diapositives (powerpoint) utilisées au cours et préalablement mises à disposition sur iCampus est vivement recommandée. Comme supports de cours facultatifs et disponibles en bibliothèque : - D.A. Mc Quarrie, J.D. Simon, Physical Chemistry. A molecular approach, University Science Books, 1997 - Atkins & mp; De Paula, Chimie Physique, Ed. De Boeck Université, 2008
<b>Cycle et année d'étude :</b>	<a href="#">&gt; Master [120] bioingénieur : chimie et bio-industries</a>
<b>Faculté ou entité en charge:</b>	AGRO