LCHM2150

2015-2016

Chimie physique et calculs physico-chimiques II

5.0 crédits	45.0 h + 10.0 h	1q

Enseignants:	Leyssens Tom ;
Langue d'enseignement:	Français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Thèmes abordés :	Ce cours intégrera les notions de bases de chimie physique en proposant une étude approfondie des propriétés de la matière et des modèles de la réactivité chimique. Il intégrera les aspects microscopique et macroscopique du point de vue de la thermodynamique formelle et statistique ainsi que de la cinétique.
Acquis d'apprentissage	L'objectif de ce cours est d'amener les étudiants à compléter leurs connaissances de la chimie physique et à les appliquer à l'étude de divers cas concrets. Un exposé systématique complétera la formation acquise durant le baccalauréat en thermodynamique ainsi qu'en cinétique chimique et guidera l'étudiant dans son apprentissage en l'amenant à résoudre les problèmes qui se posent dans la vie professionnelle. *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) ».*
Contenu :	Résumé : Contenu et Méthodes 1. Etude des interactions moléculaires et de leur incidence sur l'étude thermodynamique des phénomènes chimiques : Introduction aux forces intermoléculaires ; traitement dans le cadre de la thermodynamique statistique en vue de présenter le traitement des phases condensées (méthodes de simulation Dynamique moléculaire et Méthode de Monte Carlo). 2. Définition et étude des propriétés moléculaires (dipôles, quadripôles, polarisabilité). 3. Dynamique des réactions moléculaires : théorie des collisions, théorie du complexe activé, surfaces d'énergie potentielle, paramètres d'activation, mécanismes réactionnels, réactions contrôlées par la diffusion, 4. Réactions complexes : réactions en chaîne linéaire et/ou ramifiée polymérisation, catalyse homogène, acide-base, enzymatique, auto-catalyse, réactions oscillantes, effets de solvant
Autres infos :	Pré-requis : - Chimie physique I (CHM 1351) Mode d'évaluation : - Examen écrit Support : - Structure détaillée du cours - Ouvrages de référence
Faculté ou entité en charge:	CHIM

Programmes / formations proposant cette unité d'enseignement (UE)

Intitulé du programme	Sigle	Crédits	Prérequis	Acquis d'apprentissage
Master [120] en sciences chimiques	CHIM2M	5	-	
Master [60] en sciences chimiques	CHIM2M1	5	-	