

5 crédits	45.0 h + 19.0 h	Q1
-----------	-----------------	----

Enseignants	Leyssens Tom ;
Langue d'enseignement	Français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Préalables	<i>Le(s) prérequis de cette Unité d'enseignement (UE) sont précisés à la fin de cette fiche, en regard des programmes/formations qui proposent cette UE.</i>
Thèmes abordés	Aspect phénoménologique de la thermodynamique : structure de la matière, 1 ^{ère} et 2 ^{ème} lois de la thermodynamique, changement d'état : matériaux purs, mélanges, diagrammes de phase, réaction chimique, modèles thermochimiques. Aspects phénoménologiques de la cinétique chimique : constante de vitesse et ordres de réaction, cinétiques simples et complexes, réaction et diffusion, processus de surface. Aspects microscopiques de la thermodynamique et théorie cinétique : thermodynamique statistique : nombre de complexions, différentes distributions, fonction de partition (tr-rot.-vib.), dérivation des fonctions thermodynamiques, théories cinétiques : théorie du complexe activé, surface de potentiel et dynamique de collision. Exercices : Les exercices permettront de concrétiser et de mettre en pratique les notions de thermodynamique et de cinétique chimique enseignées. Le recours aux micro-ordinateurs est un élément important de cet apprentissage, permettant de considérer des problèmes d'une complexité normale.
Acquis d'apprentissage	<p>L'objectif de ce cours est d'amener les étudiants à acquérir les connaissances de base de la chimie physique et à les appliquer à l'étude de divers cas concrets. Un exposé systématique des bases de la thermodynamique classique et statistique ainsi que de la cinétique chimique, indispensable à la formation générale d'un chimiste ou biochimiste guidera l'étudiant dans son apprentissage et l'amènera à résoudre les problèmes qui se posent dans la vie professionnelle.</p> <p>1</p> <p>-----</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	<p>L'évaluation porte sur les connaissances ainsi que sur les capacités développées au cours.</p> <p>La cote finale sera basée sur la connaissance et démonstration des concepts et la capacité d'utiliser ces concepts afin de résoudre des exercices ou des problèmes réelles. La pondération est la suivante :</p> <ul style="list-style-type: none"> - Connaissance et reproduction des démonstrations et concepts (20%) - Résolution/ interprétions d'une mise en situation/ problème plus complexe (80%) <p>Cette partie de l'évaluation aura lieu lors d'un examen écrit en Janvier.</p>
Méthodes d'enseignement	Les concepts de base de chaque chapitre seront expliqués lors d'un cours magistral. En parallèle, une série d'exercices est proposée aux étudiants. Ces exercices peuvent être fait à la propre initiative de l'étudiant et en parallèle durant des séances d'exercices. Des examens des années précédentes sont disponible sur moodle.
Contenu	<p>La Chimie Physique est la partie de la chimie qui s'intéresse à comprendre pourquoi et comment les changements chimiques (ex. les réactions) ou physico-chimiques (ex. transition de phase) ont lieu. Classiquement la chimie physique est divisée en trois branches selon les aspects de compréhension visés.</p> <ul style="list-style-type: none"> • La thermodynamique formelle : en décrivant macroscopiquement les différents états avant et après le changement (ex. réactifs et produits), et en se basant sur trois principes de base, on essaie de découvrir pq les transformations ont lieu, qu'est-ce que ce changement implique pour le système et l'environnement, ... On ne se soucie pas de ce qui se passe lors du changement, ni des changements au niveau moléculaire. • La cinétique : s'intéresse à ce qui se passe lors du changement d'un état à un autre. La compréhension du chemin suivi, permettra éventuellement de l'influencer par des facteurs externes. La cinétique se base sur des observations expérimentales pendant les changements. • La thermodynamique statistique : est la partie de la Chimie Physique qui essaie de lier les propriétés macroscopiques et changement du système, aux variations qui ont lieu au niveau microscopique. A travers les traitements statistiques, on essaie d'expliquer les variations en état (thermo formelle) et les changements (cinétique) d'un point de vu moléculaire, ce qui est souvent plus parlant au 'chimiste'.
Ressources en ligne	Les concepts de base de chaque chapitre seront expliqués lors d'un cours magistral. En parallèle, une série d'exercices est proposée aux étudiants. Ces exercices peuvent être fait à la propre initiative de l'étudiant et en parallèle durant des séances d'exercices. Des examens des années précédentes ainsi que l'ensemble des slides sont disponible sur moodle.

Autres infos

Contenu

1. Properties of gases
 1. Definitions
 2. Ideal gas
 3. Real gas
2. 1st law of thermodynamics
 - 2.1 Work and heat
 - 2.2 Energy conservation (1st law)
 - 2.3 Work reconsidered
 - 2.4 Heat reconsidered
 - 2.5 Enthalpy
 - 2.6 Thermochemistry
 - 2.7 State functions
3. Entropy (2nd and 3rd law)
 - 3.1 Spontaneous change
 - 3.2 Entropy a state function
 - 3.3 2nd law of thermodynamics
 - 3.4 Estimating entropy changes
 - 3.5 Entropy varies with T and p
 - 3.6 3rd law of thermodynamics: S at 0K
4. The total system
 - 4.1 Free energy
 - 4.2 G and A state functions
 - 4.3 T and p effects on G
 - 4.4 G varies with composition
5. Phase equilibria
 - 5.1 Definitions
 - 5.2 Single component phase diagram
 - 5.3 Gibb's energy related to phase diagrams
 - 5.4 A theoretical basis for T-P phase diagrams
 - 5.5 Supercritical fluids
6. Phase equilibria - liquid/liquid
 - 6.1 Definitions
 - 6.2 Ideal solutions
 - 6.3 Fractional distillation
 - 6.4 Non-ideal solutions
 - 6.5 Non-miscible solutions
7. Phase equilibria - solid/liquid
 - 7.1 Definitions
 - 7.2 Melting of alloys
 - 7.3 How to make phase diagrams
 - 7.4 Complete miscibility
 - 7.5 Complete immiscibility
 - 7.6 Partial miscibility
8. Phase equilibria - solutions
 - 8.1 Definitions
 - 8.2 gases in solution
 - 8.3 solid compounds in solution
 - 8.4 solution thermodynamics
9. Statistical thermodynamics
 - 9.1 The energy of a molecule
 - 9.2 The Boltzmann distribution
10. Thermodynamic properties from Statistical thermodynamics
 - 10.1 Internal energy U
 - 10.2 pressure p
 - 10.3 Enthalpy
 - 10.4 B revisited
 - 10.5 Entropy
 - 10.6 Helmholtz free energy A
 - 10.7 Gibb's free energy G
 - 10.8 Cv, Cp
 - 10.9 Chemical potential
 - 10.10 The partition function
11. The partition function, a molecular point of view
 - 11.1 Particles without interaction
 - 11.2 The molecular partition function
 - 11.3 q and thermodynamic properties
 - 11.4 q taken apart
 - 11.5 perfect mono-atomic gas
 - 11.6 perfect bi-atomic gas
 - 11.7 Perfect poly-atomic gas
12. Statistical thermodynamics and equilibrium
 - 12.1 Chemical equilibrium

Faculté ou entité en charge:	SC
------------------------------	----

Programmes / formations proposant cette unité d'enseignement (UE)				
Intitulé du programme	Sigle	Crédits	Prérequis	Acquis d'apprentissage
Bachelier en sciences chimiques	CHIM1BA	5	LCHM1111 ET LCHM1211 ET LCHM1252	