

**CHIM2161 Chimie physique et calculs physico-chimiques 1ère partie: thermodynamique
2ème partie: cinétique**

[67.5h+29h exercices] 9 crédits

Enseignant(s): Daniel Peeters, Jacques Vandooren
Langue d'enseignement : français
Niveau : cours de 2ème cycle

Objectifs (en terme de compétences)

Exposé systématique de la thermodynamique classique et statistique ainsi que des bases de cinétique chimique, indispensable à la formation générale d'un chimiste ou biochimiste.

Objet de l'activité (principaux thèmes à aborder)

Aspect phénoménologique de la thermodynamique : structure de la matière, 1ère et 2ème lois de la thermodynamique, changement d'état : matériaux purs, mélanges, diagrammes de phase, réaction chimique, modèles thermo-chimiques. 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, thermo-chimie théorique et liaison chimique, théories cinétiques : théorie du complexe activé, surface de potentiel et dynamique de collision. Aspects phénoménologiques de la cinétique chimique : constante de vitesse, cinétique complexe, réaction et diffusion, processus de surface. 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.

Résumé : Contenu et Méthodes

(Partie I. de Aguirre)

Cinétique formelle des réactions qui répondent à un ordre (0, n). Quelques schémas de réactions qui ne répondent pas à un ordre : complexation catalyseur réactifs, intermédiaires réactionnels et principe de la quasi-stationnarité. Exemples : synthèse HBr, auto-oxydation, catalyse, ...

Cinétique de réactions composées : concurrentes, consécutives, réversibles.

(Partie D. Peeters)

Les notions d'ensemble et de fonction de partition sont introduites et reliées aux diverses propriétés thermodynamiques d'un système quelconque. Ces notions sont ensuite appliquées à des systèmes de particules discernables et indiscernables sans interaction (Gaz monoatomique, diatomique et polyatomique). L'équilibre chimique des réactions est explicité et les aspects cinétiques sont abordés par la théorie de l'état de transition. L'extension vers des systèmes présentant des interactions intermoléculaires est introduite.

(Partie P. Van Tiggelen)

Après le rappel du gaz parfait, on traite des gaz réels des points de vue macro- et microscopiques. Les fonctions d'état introduites par les trois principes de la thermodynamique sont appliquées à l'équilibre chimique. On examine de façon systématique les équilibres de phase. Des exemples numériques illustrent le développement des notions.

Méthodes d'enseignement et d'apprentissage :

Cinq séances sont consacrées à la résolution individuelle de problèmes de cinétique complexe sur PC.

Autres informations (Pré-requis, Evaluation, Support, ...)

Pré-requis : Chimie générale + outil mathématique

Mode d'évaluation : Examen écrit

Support : Structure détaillée du cours et ouvrages de référence

Encadrement : Cotitulaires et assistants