



**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 :** Second cycle

**Objectifs (en termes 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 thermochimiques. 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, thermochimie 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.

**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