



**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 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.

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