



CHM1351 Chimie physique et calculs physico-chimiques 1

[45h+19h exercices] 6 crédits

Ce cours n'est pas dispensé en 2005-2006

Langue d'enseignement : français

Niveau : Premier cycle

Objectifs (en termes de compétences)

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.

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 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.