



CHM1351 Chimie physique et calculs physico-chimiques 1

[45h+19h exercices] 6 crédits

Enseignant(s): Daniel Peeters (coord.), Jacques Vandooren
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, 1^{ère} et 2^{ème} lois de la thermodynamique, changement d'état : matériaux purs, mélanges, diagrammes de phase, réaction chimique, modèles thermo-chimiques.

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.

Autres crédits de l'activité dans les programmes

CHIM13BA	Troisième année de bachelier en sciences chimiques	(6 crédits)	Obligatoire
-----------------	--	-------------	-------------