



## PHYS2110 Physique statistique moléculaire

[30h] 4 crédits

Cette activité se déroule pendant le 1er semestre

**Enseignant(s):** André Nauts  
**Langue d'enseignement :** français  
**Niveau :** Deuxième cycle

### Objectifs (en termes de compétences)

Interpréter, à l'échelle moléculaire, les résultats de la thermodynamique et de la cinétique chimique grâce aux formalismes de la Mécanique Quantique et de la Mécanique Statistique.

### Objet de l'activité (principaux thèmes à aborder)

1. Thermodynamique statistique Formule de Boltzmann ; la thermodynamique statistique d'équilibre ; le gaz parfait, monoatomique et biatomique, en statistique quantique de Maxwell-Boltzmann, avec la correction de Bose-Einstein ; les expressions générales de  $U(T)$  et  $H(T)$  ; calcul des chaleurs de réaction et constantes d'équilibre ; calcul des constantes de vitesse, dans le cadre de la théorie de Eyring. 2. Physique théorique moléculaire Les méthodes de la physique théorique moléculaire : Hartree-Fock-Roothaan et interaction de configurations ; le calcul des propriétés moléculaires : les grandeurs structurales, densité électronique, moment dipolaire électrique, potentiel électrostatique et les grandeurs énergétiques ; les bases physiques du phénomène de liaison chimique.

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

Prérequis :

Chimie générale (CHIM 1120 et CHIM 1130) - Eléments de mécanique statistique et de mécanique quantique vus en physique.

/ Débouchés : Recherche en physique moléculaire - Enseignement de la chimie dans le secondaire. /

Mode d'évaluation :

Examen oral avec préparation écrite

Support :

Notes rédigées par le titulaire.

Indication d'ouvrages recommandés.

### Autres crédits de l'activité dans les programmes

PHYS22/A	Deuxième licence en sciences physiques (Physique appliquée) (4 crédits)	Obligatoire
PHYS22/G	Deuxième licence en sciences physiques (4 crédits)	Obligatoire