

5.00 crédits	45.0 h + 15.0 h	Q1
--------------	-----------------	----

Enseignants	Debecker Damien ;
Langue d'enseignement	Français > English-friendly
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Thèmes abordés	Mise en l'uvre de deux approches physico-chimiques complémentaires pour la prévision et la maîtrise des propriétés de la matière. PROPRIETES MACROSCOPIQUES ET INTERPRETATION MOLECULAIRE-CINETIQUE. Connaissance des lois fondamentales régissant le déroulement des réactions chimiques // Interprétation des données expérimentales de cinétique pour la déduction des mécanismes réactionnels. - EQUILIBRES DE PHASE. Etude des équilibres de phase des systèmes condensés (liquide/liquide ; liquide/solide) et des systèmes liquide/vapeur à plusieurs constituants : interprétation et utilisation des diagrammes d'équilibre entre phases // Etude thermodynamique des systèmes réels à plusieurs constituants (cas des solutions) : utilisation des outils thermodynamiques pour la résolution des problèmes d'équilibre de phase. PROPRIETES DES PARTICULES ET PREVISION DES PROPRIETES MACROSCOPIQUES- MECANIQUE STATISTIQUE. Les concepts de base // Application aux systèmes gazeux // Calcul a priori des grandeurs thermodynamiques // Application à l'énergie libre chimique // Notions de thermodynamique du non-équilibre.
Acquis d'apprentissage	A la fin de cette unité d'enseignement, l'étudiant est capable de : Savoir relatif aux propriétés de la matière et à leur compréhension à partir de l'échelle corpusculaire/moléculaire.Savoir-faire en physico-chimie : quantification, conceptualisation, modélisation.Développement d'une attitude adéquate vis-à-vis de la compréhension des propriétés de la matière et de leur maîtrise. 1
Modes d'évaluation des acquis des étudiants	Examen écrit couvrant l'ensemble des AA annoncés pour le cours (théorie et exercices).
Méthodes d'enseignement	Cours magistral avec usage d'un powerpoint mis à disposition sur Moodle en amont des cours. Les diapositives sont utilisées comme support à l'exposé magistral mais une grande partie de l'information (explications, contexte, motivation, exemples, développements mathématiques, exemples chiffrés, visualisation de graphiques, etc.) est donnée oralement et au tableau pendant le cours. Des séances dirigées de résolution d'exercices sont organisées (TP). Certains cours peuvent être dispensé en visio-conférence.
Contenu	Introduction Objectif du cours, consignes pratiques, information concernant l'examen Contexte du cours, articulation avec les prérequis et annonce des liens avec les cours suivants Partie 1: Cinétique chimique Vitesse de réaction (définitions). Relation avec la thermodynamique chimique (conservation de la matière, principe de Berthelot, principe de Matignon, principe de La Chatelier). Equations cinétiques des processus chimiques. Energie d'activation. Ordres de réactions. Ordres cinétiques des espèces. Dégénérescence des ordres cinétiques. Temps de demi-vie. Réactions simples. Réactions équilibrées. Méthodes de linéarisation. Influence de la température sur les vitesses de réaction et sur les équilibres. Réactions irréversibles et réversibles. Réactions parallèles. Réactions consécutives (compétitives et non compétitives). Exemple d'application des résultats d'études cinétiques. Théorie des collisions et du complexe activé. Cinétique des réactions catalytiques. Cinétique des réactions de formation des polymères. Polymérisation en chaîne. Polymérisation par étapes. Cette partie est accompagnée de 4 séances d'exercices (TP). Partie 2: Thermodynamique des systèmes multiphasiques Définition de « phase ». Diagramme de phase de l'eau. Relation de Clausius-Clapeyron. Règle des phases. Diagrammes de phase des systèmes liquide/liquide, liquide/solide et liquide/vapeur à plusieurs constituants. Thermodynamique des solutions idéales. Thermodynamique des solutions réelles (grandeurs molaires partielles, énergie libre du solvant et des solutés, détermination de l'activité des solutés à partir des propriétés du solvant). Utilisation des outils thermodynamiques pour l'étude des propriétés colligatives des solutions diluées (pression de vapeur, point d'ébullition, point de congélation et pression osmotique). Cette partie est accompagnée de 3 séances d'exercices (TP).

	<p>Partie 3: Thermodynamique statistique</p> <p>Introduction, concepts de base et motivation. Energie du système vs. énergie moléculaire. Lien macro-micro. Hypothèse d'ergodicité. Définition du microétat, de la configuration. Postulats de la thermodynamique statistique. Loi de Boltzmann et fonction de partition. Théorie cinétique et équation d'état des gaz. Calcul a priori des grandeurs thermodynamiques (énergie interne, enthalpie, énergie libre, entropie, chaleur molaire, pression). Participation des quatre contributions énergétiques (translation, rotation, vibration, mouvements électroniques) aux propriétés thermodynamiques des gaz monoatomiques et des molécules diatomiques. Application au calcul a priori de l'équilibre chimique.</p>
Ressources en ligne	<p>Moodle:</p> <ul style="list-style-type: none"> - les slides sont déposés à l'avance. Les étudiants sont encouragés à les emmener au cours pour les annoter. - fichiers excel permettant de visualiser certains concepts expliqués au cours, via des exemples chiffrés et des graphiques. - rappels mathématiques et retranscription de certaines démonstrations mathématiques. - liste des exercices vus au TP
Bibliographie	<p>Aucun support payant n'est obligatoire.</p> <p>Une impression des diapositives (powerpoint) utilisées au cours et préalablement mises à disposition sur Moodle est vivement recommandée.</p> <p>Comme supports de cours facultatifs et disponibles en bibliothèque :</p> <ul style="list-style-type: none"> - D.A. Mc Quarrie, J.D. Simon, Physical Chemistry. A molecular approach, University Science Books, 1997 - Atkins & De Paula, Chimie Physique, Ed. De Boeck Université, 2008
Autres infos	<p>Ce cours peut être donné en anglais.</p>
Faculté ou entité en charge:	<p>AGRO</p>

Programmes / formations proposant cette unité d'enseignement (UE)				
Intitulé du programme	Sigle	Crédits	Prérequis	Acquis d'apprentissage
Master [120] : bioingénieur en chimie et bioindustries	BIRC2M	5		