

# Thermodynamique statistique et Simulation Moléculaire

---

Equipe pédagogique :

Cours : Fabien Cailliez, [fabien.cailliez@universite-paris-saclay.fr](mailto:fabien.cailliez@universite-paris-saclay.fr)

TD : Jérôme Creuze, [jerome.creuze@universite-paris-saclay.fr](mailto:jerome.creuze@universite-paris-saclay.fr)

TP: Fabien Cailliez, [fabien.cailliez@universite-paris-saclay.fr](mailto:fabien.cailliez@universite-paris-saclay.fr)

# Organisation de l'enseignement

- **Contenu des séances :**
  - 10 séances de cours de 2h
  - 10 séances de TD de 2h
  - 2 TP informatisés d'une journée (écriture du CR inclus) à la mi-mars
- **Supports pédagogiques :**
  - Polycopié de cours / bibliographie
  - Note : le plan du cours suivra celui du polycopié mais l'ordre des arguments pourra être un peu différent et il y aura parfois quelques ajouts/suppressions
  - Polycopié de TD
- **Evaluation :**
  - Examen avec documents (70%)
  - Travaux Pratiques (30%)

## Que va-t-on faire ? A quoi sert ce cours ?

- Objectifs du cours :
  - Faire le lien entre la description microscopique d'un système et la mesure de grandeurs macroscopiques (thermodynamiques)
  - Retrouver la thermodynamique classique pour des systèmes moléculaires
  - Mettre en place les principes de la simulation numérique des systèmes moléculaires

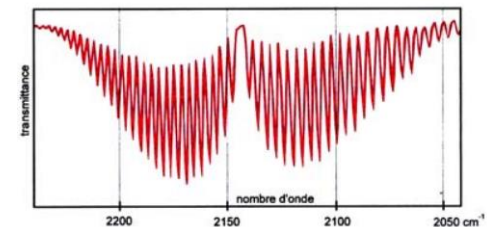
# Que va-t-on faire ? A quoi sert ce cours ?

- Objectifs du cours :

- Faire le lien entre la description microscopique d'un système et la mesure de grandeurs macroscopiques (thermodynamiques)
- Retrouver la thermodynamique classique pour des systèmes moléculaires
- Mettre en place les principes de la simulation numérique des systèmes moléculaires

- Exemples de questions auxquelles on pourra répondre à la fin du cours ?

- Comment fait-on le lien entre les propriétés moléculaires et les propriétés thermodynamiques ?
- Pourquoi un système « dynamique » à l'échelle microscopique est-il « statique » à l'échelle macroscopique ?
- Comment peut-on prévoir les valeurs des constantes d'équilibre de réaction ou des constantes de vitesse ?
- Que vaut la capacité calorifique molaire d'un gaz (parfait) diatomique et pourquoi ne dépend-elle pas de la nature du gaz ? Et celle d'un solide  $3R$  à haute température ?
- Comment peut-on expliquer la forme d'un spectre de rotation de diatomiques ?
- Pourquoi un gaz se condense-t-il ?



## Ce que ne doit pas être ce cours...

- Un monologue de l'enseignant :
  - Participation active SVP !
  - Utilisation de quizz interactifs
- Un déluge de formules
  - Oui il y en aura... Mais pas que !
- Un cours complètement abstrait
  - On va prendre des exemples
  - Il faut poser des questions !

# Partie 0

## Thermodynamique classique

---

1. Le système thermodynamique
2. Les postulats et principes
3. Les fonctions d'état
4. Équilibre et évolution d'un système thermodynamique

# Partie 0

## Thermodynamique classique

---

1. Le système thermodynamique
2. Les postulats et principes
3. Les fonctions d'état
4. Équilibre et évolution d'un système thermodynamique

# Partie 0

## Thermodynamique classique

---

1. Le système thermodynamique
2. **Les postulats et principes**
3. Les fonctions d'état
4. Équilibre et évolution d'un système thermodynamique



# Partie 0

## Thermodynamique classique

---

1. Le système thermodynamique
2. Les postulats et principes
3. **Les fonctions d'état**
4. Équilibre et évolution d'un système thermodynamique

# Partie 0

## Thermodynamique classique

---

1. Le système thermodynamique
2. Les postulats et principes
3. Les fonctions d'état
4. Équilibre et évolution d'un système thermodynamique