

Analyse moléculaire et structurale (RMN, SM, IR, UV, Fluorescence, analyse en ligne)

Volume Horaire		Responsable Pédagogique		Unité d'Enseignement
Cours	17:20:00	Nom	J. DURAND	Chimie analytique
Cours-TD	0:00:00			
TD	24:00:00	Pédagogie Active		Coefficient
TP	0:00:00	PEG/ Amphi inversé		2
				Mode d'Evaluation
				2 Epreuves écrites

Connaissances et Capacités

- Comprendre les phénomènes mis en jeu en spectroscopie RMN/IR-Raman/UV-Visible et spectrométrie de masse.

Etre capable d'interpréter les spectres (RMN 1-D) des noyaux (H, C) ; IR –Raman ; UV-Visible et de masse pour résoudre des questions de détermination de structure, de suivi de réaction et de quantification.

- Connaître la mise en œuvre spécifique de ces techniques expérimentales.
- Etre capable de choisir la configuration technique adaptée à une problématique donnée.
- Etre capable de proposer et de mettre en œuvre une méthode pour la quantification de composés chimiques.
- Etre capable d'identifier les constituants d'un analyseur en ligne.
- Etre capable de rechercher une solution d'analyse en ligne pour le suivi d'un paramètre sensible (ie concentration d'espèce chimique) indispensable à la maîtrise du procédé.

Contenu du cours- Syllabus

Résonance Magnétique Nucléaire

- Le phénomène de résonance magnétique nucléaire
- Les spectres de résonance des noyaux (1H, 13C)

Spectroscopies vibrationnelles et électroniques

- Introduction
- Spectroscopie infra-rouge : principe et règles de sélection
- Spectroscopie Raman : principe et règles de sélection
- Application de la théorie des groupes aux spectroscopies vibrationnelles
- Analyse de composés organiques et inorganiques

Date de Mise à Jour Mars 2016

- Spectroscopies électroniques : principes et règles de sélection
- Construction et utilisation des diagrammes d'Orgel et de Tanabe-Sugano

Spectrométrie de masse

- Introduction
- Composition d'un spectromètre de masse
- Ionisation par impact électronique. Quelques règles de fragmentation
- Informations obtenues à partir d'un spectre de masse
- Couplages chromatographie-spectrométrie de masse
- Applications

Introduction à l'analyse en ligne

- Familiariser les étudiants à l'importance de l'analyse en ligne pour les procédés chimiques.
- Introduire les principaux systèmes d'échantillonnage, analyseurs optiques, analyseurs électrochimiques et analyseurs chromatographiques rencontrés en analyse industrielle.

Ouvrages de Référence

- LA SPECTROSCOPIE DE RMN. Principes de bases, concepts et applications de la spectroscopie de résonance magnétique nucléaire du proton et du carbone 13 en chimie, Harald Gunther, Elsevier Masson, 1993.
- La spectroscopie infrarouge et ses applications analytiques, D. Bertrand ; Ed. Tec & Doc Lavoisier, 2005
- Inorganic spectroscopic methods, A. K. Bridson, Oxford Science Publication, 1998.
- Chimie et théorie des groupes, P. H. Walton, Ed. de Boeck, 2001.
- Identification spectrométrique de composés organiques, R.M. Silverstein, F.X. Webster, D.J. Kiemle, Ed. de Boeck, 2007.
- Interpretation of mass spectrometry, F. McLafferty, F. Turecek, Ed. University Science Books, 1993.
- Mass Spectrometry: Principles and Applications, E. Hoffmann, V. Stroobant, Ed. Wiley, 2007.
- Les analyseurs industriels, M. Grout, Ed. Hermès Sciences, 2000.

Chimie des solutions

Volume Horaire		Responsable Pédagogique		Unité d'Enseignement
Cours	9:20:00	Nom	P. BEHRA	Chimie analytique
Cours-TD	0:00:00			
TD	6:40:00	Pédagogie Active		Coefficient
TP	0:00:00	0		1
				Mode d'Evaluation
				Epreuve écrite

Connaissances et Capacités

- Savoir appréhender la spéciation, la réactivité et le dosage quantitatif de solutés dans les phases liquides
- Etre capable de calculer les diagrammes de spéciation et de déterminer les domaines d'analyse quantitative
- Savoir utiliser un logiciel de calcul de spéciation, à l'équilibre (phase aqueuse, gazeuse, précipitation-dissolution)
- Savoir mettre en œuvre les concepts de spéciation pour l'analyse et/ou la séparation de composés dans des matrices complexes

Contenu du cours- Syllabus

- Introduction à la chimie analytique
- Notions de solvants non-aqueux
- Complexes en solution
- Constantes conditionnelles
- Titrages complexométriques
- Erreurs de mesure en complexométrie
- Quelques considérations cinétiques
- Précipitation-dissolution et application à la chimie analytique
- Extraction liquide-liquide et masquage
- Concepts de spéciation – Calcul de spéciation (utilisation d'un logiciel)
- Spectrométrie atomique

Ouvrages de Référence

- Brisset, J.L., Addou, A., Draoui, M. & Moussa, D., 2005. *Chimie analytique en solution - Cours et applications*. Tec & Doc, Paris
- Delcourt, M.O., Bois, N., Chouaib, F., 2001. *Equilibres chimiques en solution*. De Boeck Université, Bruxelles
- Skoog, D.A., West, D.M. & Holler, F.J., 1997. *Chimie Analytique*. De Boeck Université, Paris, Bruxelles.
- Skoog, D.A., West, D.M., Holler, F.J., & Crouch, S.R., 2012. *Chimie Analytique*. De Boeck Université,
- Rouessac, F., Rouessac, A. et al., 2016. *Analyse chimique – Méthodes et techniques instrumentales*. 8^{ème} éd. Dunod, Paris

Liaison chimique Champ des ligands

Volume Horaire	
Cours	6:40:00
Cours-TD	0:00:00
TD	4:00:00
TP	0:00:00

Responsable Pédagogique	
Nom	P. SERP

Unité d'Enseignement
Liaison chimique - Modélisation - Simulation moléculaire

Pédagogie Active
0

Coefficient
1

Mode d'Evaluation
Epreuve écrite

Connaissances et Capacités

- Connaître les bases sur les différents types de liaisons chimiques
- commencer à appréhender la réactivité chimique

Contenu du cours- Syllabus

1. Introduction
La classification périodique
2. Type de liaison
 - 2.1 La liaison ionique
 - 2.2 La liaison covalente
 - 2.3 La liaison métallique
 - 2.4 Les liaisons faibles
3. Théorie de la liaison
 - 3.1 Théorie de la liaison de valence
 - 3.2 Théorie du champ de ligands
 - 3.3 La liaison de coordination

Ouvrages de Référence

Chimie inorganique, D.F. Shriver, P.W. Atkins - DeBoeck (2001), ISBN : 2-7445-0110-7
Chimie inorganique, J. Huheey & R. Keiter & E. Keiter - DeBoeck (2000), ISBN : 2-8041-2112-7

Liaison chimique Modélisation Théorie des groupes

Volume Horaire	
Cours	17:20:00
Cours-TD	0:00:00
TD	12:00:00
TP	0:00:00

Responsable Pédagogique	
Nom	C.DUFAURE

Unité d'Enseignement
Liaison chimique - Modélisation - Simulation moléculaire

Pédagogie Active
0

Coefficient
2

Mode d'Evaluation
Epreuve écrite

Connaissances et Capacités

Compréhension à l'échelle atomique de la structure des molécules par résolution de l'équation de Schrödinger pour des cas simples.

Détermination de relations entre cette structure, les propriétés de la matière et les processus chimiques afin d'aider les expérimentateurs à interpréter leurs résultats.

Contenu du cours- Syllabus

- Notions de Mécanique Quantique
- Approche Hartree-Fock / Huckel
- Orbitales Moléculaires, liaisons chimiques
- Réactivité

Ouvrages de Référence

Eléments de chimie quantique, à l'usage des chimistes, JL Rivail, 2000, CNRS Editions.

Méthodologie analytique

Volume Horaire		Responsable Pédagogique		Unité d'Enseignement
Cours	6:40:00	Nom	-C. SABLAYROOLLES	Chimie analytique
Cours-TD	0:00:00			
TD	2:40:00	Pédagogie Active		Coefficient
TP	0:00:00	Non		0 (pas de coefficient)
				Mode d'Evaluation
				Via les évaluations des différentes matières de l'UE

Connaissances et Capacités

- * Connaître les grandes étapes de la démarche analytique.
- * Etre capable d'évaluer les notions d'hétérogénéité et de représentativité des échantillons
- * Connaître les principes de préparation, conservation et traitement des échantillons.
- * Connaître les méthodes d'analyse quantitative.
- * Savoir mettre en œuvre les notions de statistique et probabilité pour réaliser un traitement de données.

Contenu du cours- Syllabus

Introduction

Généralités : *analyse chimique vs chimie analytique*

Etapes de l'analyse : *Echantillonnage -prélèvement / Traitement de l'échantillon / Mesure*

Paramètres de validation d'une méthode : *Exactitude / précision / Répétabilité / Reproductibilité / Linéarité / Limite de détection et quantification / sensibilité / sélectivité*

Traitement de la donnée : *erreur systématique / erreur aléatoire / incertitude associée à une mesure*

Méthodes d'étalonnage en analyse quantitative : *étalonnage externe, interne, ajouts dosés, normalisation interne*

Ouvrages de Référence

D.A. Skoog, D.M. West, F.J. Holler CHIMIE ANALYTIQUE De Boeck Supérieur, 3 avr. 1997 - 996 pp

J. Mendham ANALYSE CHIMIQUE QUANTITATIVE DE VOGEL De Boeck Supérieur, 19 déc. 2005 - 889 pp

Projet Communication et Projet professionnel (fiches métier)

Volume Horaire		Responsable Pédagogique		Unité d'Enseignement
Cours	4:00:00	Nom	C. BRANDAM	Projet professionnel
Cours-TD	0:00:00			
TD	5:20:00	Pédagogie Active		Coefficient
TP	0:00:00	0		1
				Mode d'Evaluation
				Projet et fiche métier

Connaissances et Capacités

Se documenter sur un métier référence visé.
Prendre contact avec un ingénieur en activité.
Passer les tests de personnalité mis à disposition.
Analyser l'ensemble des informations pour envisager son projet professionnel.

Contenu du cours- Syllabus

Présentation des attendus du dossier métier à rendre dans le cadre du Passeport Projet Professionnel

Ouvrages de Référence

Réacteurs idéaux et transfert thermique

Volume Horaire		Responsable Pédagogique		Unité d'Enseignement
Cours	16:00:00	Nom	J. ALBET	Procédés industriels et Thermodynamique
Cours-TD	0:00:00			
TD	6:40:00	Pédagogie Active		Coefficient
TP	0:00:00	APP		1,5
				Mode d'Evaluation
				Epreuve écrite

Connaissances et Capacités

- Comprendre les mécanismes de transmission de la chaleur (Conduction-Convection)
- Savoir dimensionner un calorifugeage (mur, tube, sphère)
- Savoir calculer les appareils industriels d'échange de chaleur
- Savoir calculer voire optimiser le rendement, la sélectivité d'une transformation chimique (réactions compétitives, consécutives, systèmes mixtes) dans le cas des réacteurs idéaux
- Comprendre l'influence des conditions opératoires sur les performances de la réaction
- Savoir modéliser les échanges thermiques dans des cas simples (réacteur isotherme, adiabatique, température de paroi constante)

Contenu du cours- Syllabus

- Etude du transfert thermique conduction, convection, rayonnement. Isolation thermique. Calcul des échangeurs de chaleur.
- Mise en œuvre optimale de réactions à stœchiométries multiples
- Etude de l'influence des conditions physiques, température, pression, dilution : réglage optimal de la température du réacteur – POT
- Etude des bilans énergétiques dans les réacteurs idéaux

Ouvrages de Référence

Transmission de la chaleur WH Mc ADAMS, Dunod ed.,PARIS, 1961
 Principles of heat transfer F. KREITH, 3ème ed. IEP-A Dun Donneley publisher NEW YORK 1967
 Engineering heat transfer, S. T. HSU Van Nostrand, Toronto new york, 1976
 Process heat transfer, D.Q. KERN, McGraw-HILL Book Company, 1950 Jacques Villermaux, *Génie de la réaction chimique : conception et fonctionnement des réacteurs*, 1993, Éditions Tec et Doc

Daniel Schweich, *Génie de la réaction chimique*, 2001, Éditions Tec et Doc
Octave Levenspiel, *Chemical Reaction Engineering*, 3^e éd., 1999, John Wiley & Sons
H. Scott Fogler, *Elements of Chemical Reaction Engineering*, 4^e éd., 2005, Prentice Hall
Gilbert F. Fromen, Kenneth B. Bischoff et Juray De Wilde, *Chemical Reactor Analysis and Design*, 3^e éd., 2011, John Wiley & Sons
Mark E. Davis et Robert J. Davis, *Fundamentals of Chemical Reaction Engineering*, 1^{re} éd., 2003, The McGraw-Hill Companies

Réactivité organique

Volume Horaire		Responsable Pédagogique		Unité d'Enseignement
Cours	26:40:00	Nom	S. THIEBAUD	Réactivité organique
Cours-TD	0:00:00			
TD	24:00:00	Pédagogie Active		Coefficient
TP	0:00:00	0		1,5 et 2,5
				Mode d'Évaluation
				2 Epreuves écrites

Connaissances et Capacités

Comprendre la structure moléculaire des composés organiques. Être capable d'identifier la réactivité des fonctions présentes et de la moduler. Être capable de prévoir les différentes réactions (principales et secondaires) dans un milieu réactionnel donné.

Contenu du cours- Syllabus

Compléments de nomenclature - Rappels hybridation, liaisons chimiques et interactions moléculaires – Stéréochimie - Concepts acide/base affectant la réactivité – Solvants - Réactivité fonctionnelle et mécanistique (addition, substitution, élimination, réactifs organométalliques) - Enchaînements réactionnels -

Ouvrages de Référence

- Chimie organique : Pierre Grécias (Dunod) - Chimie organique : René Milcent (Edp sciences)
 - Traité de chimie organique : K. Peter C. Vollhardt – Neil Eric Shore (De Boeck Université) -
 Stéréochimie des composés organiques : Ernest Eliel (Tec et Doc) - Quelques concepts directeurs de
 la Chimie organique : Pierre Laszlo (Ellipses) - Chimie organique : Pierre Vogel (De Boeck Université) -
 Les bases de la chimie organiques : Guy Decodts (coll. PCEM) - Invitation à la chimie organique :
 Johnson Williams (De Boeck Université) - Comprendre la chimie organique : Alain Lassalle (Ellipses) -
 Chimie organique, licence de chimie : Christian Bellec (Vuibert) – Chimie organique : Jonathan
 Clayden, Nick Greeves, Stuart Warren (De Boeck Université) – Mécanismes réactionnels en chimie
 organique : méthodes synthétiques, stéréochimie et réactions modernes : Reinhard Bruckner (De
 Boeck Université) -

Recherche documentaire et projet

Volume Horaire		Responsable Pédagogique		Unité d'Enseignement
Cours	1:20:00	Nom	E. VEDRENNE	Projet professionnel
Cours-TD	0:00:00			
TD	24:00:00	Pédagogie Active		Coefficient
TP	0:00:00	0		2
				Mode d'Évaluation
				Projet

Connaissances et Capacités

Se familiariser avec les différents portails de recherche afin d'effectuer les recherches bibliographiques depuis l'école ou à distance.

Savoir utiliser Scifinder® pour trouver des références par mots clés, auteurs, molécules...

Savoir formuler sa recherche pour trouver des références sur des structures ou réactions particulières.

Savoir accéder aux références obtenues (journaux, brevets...).

Savoir trier les références obtenues par intérêt, pertinence, dates, accessibilité...

Savoir rédiger un rapport bibliographique sur un sujet donné.

Contenu du cours- Syllabus

Les points suivants sont abordés au cours de 3 cours-TD :

- La recherche de références par mots-clés : faire des recherches par mots-clés, auteurs, nom de molécules... Trier (années, auteurs, types de journaux, langues...) et accéder aux références obtenues. Enregistrer, imprimer les résultats obtenus. Créer une alerte (« Keep me posted »). Exercices d'application.
- La recherche de références par structure : dessiner les structures ou sous-structures en utilisant les outils Scifinder® (crochets, chaînes alkyl, groupements R, substitution non définie de noyaux aromatiques, blocage de la substitution d'atomes et de cycles...), trouver les propriétés des molécules (données expérimentales et prédites). Exercices d'application.
- La recherche de références par réaction : définir le rôle des molécules dans la réaction, les liaisons rompues ou créées, la position relative des atomes dans les réactifs et produits, les groupements fonctionnels impliqués ou non réactifs. Exercices d'application.

La rédaction d'un rapport bibliographique (15-20 pages) est ensuite demandée. Ce projet est un travail commun entre 2 ou 3 étudiants qui choisissent un sujet parmi une liste proposée par des enseignants-chercheurs. Ce rapport est évalué par l'enseignant-chercheur concerné.

Ouvrages de Référence

Tutoriels en ligne : <https://www.cas.org/training/scifinder>

Simulation moléculaire

Volume Horaire	
Cours	0:00:00
Cours-TD	0:00:00
TD	0:00:00
TP	17:30:00

Responsable Pédagogique	
Nom	C.DUFAURE

Unité d'Enseignement
Liaison chimique - Modélisation - Simulation moléculaire

Pédagogie Active
0

Coefficient
1

Mode d'Evaluation
Epreuve Orale

Connaissances et Capacités

Maîtriser les lois de la chimie théorique exploitées dans des programmes informatiques spécifiques pour modéliser ou imiter le comportement de molécules.
Application de ces programmes à des problèmes chimiques réels.

Contenu du cours- Syllabus

- Maîtrise du logiciel SPARTAN
- Calcul numérique de la structure électronique des molécules (orbitales moléculaires)
- Approches Hartree-Fock, semi-empiriques.
- Réactivité
- Surfaces de potentiel, chemins réactionnels

Ouvrages de Référence

Département Chimie (CH)

Première année, Deuxième semestre

Martine.Urrutigoity@ensiacet.fr ; Sophie.Thiebaudroux@ensiacet.fr

Ouvrages de Référence

- Analyse chimique. Méthodes et techniques instrumentales modernes, F. Rouessac, A. Rouessac (Ed. Dunod)
- Chimie analytique, D.A. Skoog, D.M. West, F.J. Holler (Ed. de Boeck)
- Chromatographies en phases liquide et supercritique, R. Rosset, M. Caude, A. Jardy (Ed. Masson)
- Manuel pratique de chromatographie en phase gazeuse, J. Tranchant (Ed. Masson)
- Ion chromatography, J. Weiss (Ed. VCH)

Thermodynamique

Volume Horaire		Responsable Pédagogique		Unité d'Enseignement
Cours	8:00:00	Nom	A. ROUAIX	Procédés industriels et Thermodynamique
Cours-TD	0:00:00			
TD	12:00:00	Pédagogie Active		Coefficient
TP	0:00:00	Amphis dynamiques		1,5
				Mode d'Evaluation
				Epreuve écrite

Connaissances et Capacités

Savoir utiliser une équation d'état pour calculer les propriétés des fluides réels
 Savoir déterminer les grandeurs caractéristiques des mélanges
 Savoir construire et utiliser un diagramme de phase binaire: L/V; L/L; S/L

Contenu du cours- Syllabus

Propriétés des corps purs (fluides réels - équations d'état en phase gaz et/ou liquide)
 Equations d'état pour la prédiction des propriétés thermodynamique des corps purs
 Grandeurs caractéristiques des mélanges
 Diagrammes d'équilibre (L/V, L/L, L/S)
 Calcul des équilibres L/V
 Solution diluée idéale et propriétés colligatives

Ouvrages de Référence

Thermodynamique – Application au génie chimique et à l'industrie pétrolière – J. Vidal ; 1997, Editions Technip, Paris
 Thermodynamique : principes et applications, P. Infelta et M. Graetzel ; 2006, Editions Brown Walker Press, Boca Raton
 Thermodynamique chimique : états de la matière, équilibres, gaz, solutions, ions : cours et exercices corrigés, M. Chabanel et B. Illien

TP Chimie analytique

Volume Horaire	
Cours	0:00:00
Cours-TD	0:00:00
TD	0:00:00
TP	84:00:00

Responsable Pédagogique	
Nom	V. SIMON

Unité d'Enseignement
Chimie analytique

Pédagogie Active
32 :00 :00

Coefficient
6

Mode d'Evaluation
Contrôle Continu et Epreuve orale

Connaissances et Capacités

- Connaître le principe des techniques analytiques utilisées en TP et les grandeurs associées.
- Connaître les notions de base de préparation d'échantillons.
- Etre capable de mettre en œuvre les techniques analytiques à partir d'un protocole opératoire.
- Etre capable de proposer et mettre en œuvre un protocole analytique à partir d'une recherche bibliographique.
- Etre capable de choisir la technique d'analyse adaptée à une problématique donnée.
- Etre capable d'exploiter, d'interpréter et de communiquer les résultats obtenus.
- Etre capable d'organiser le travail au sein d'un groupe.
- Connaître et savoir exploiter les ressources bibliographiques.

Contenu du cours- Syllabus

Les Travaux Pratiques abordent l'étude qualitative et quantitative de molécules organiques et inorganiques ainsi que la composition élémentaire de différentes matrices (alimentaires, végétales, aqueuses, alliage, médicament) *via* diverses techniques analytiques (CPG-DIF/SM, HPLC, HPIC, HPTLC, électrochimie, spectrophotométrie d'absorption atomique, dosages complexométriques et conductimétriques). Ils sont une illustration, un prolongement des Cours/TD/Préceptorat dispensés dans l'Unité d'Enseignement « UE2 : Chimie Analytique ».

Ils s'organisent en 7 séances de TP classiques et 4 séances de TP Projet (2 d'entre elles sont destinées à une recherche bibliographique sur une problématique donnée et à la mise en place d'un protocole expérimental, les 2 autres à la réalisation expérimentale).

Ouvrages de Référence

- Chimie analytique, D.A. Skoog, D.M. West, F.J. Holler (Ed. de Boeck)
- Analyse chimique quantitative de Vogel. J. Mendham, R.C. Denney et al. (Ed. de Boeck) Chimie générale. R. Didier, P. Grécias (Ed. Tech& Doc, Lavoisier).