

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

HARMONISATION

OFFRE DE FORMATION MASTER

ACADEMIQUE

Etablissement	Faculté / Institut	Département
UMMTO	SCIENCES	CHIMIE

Domaine : SM

Filière : CHIMIE

Spécialité : CHIMIE PHYSIQUE

Année universitaire : 2016/2017

1- Semestre 1 :

Unité d'Enseignement	VHS	V.H hebdomadaire				Coeff	Crédits	Mode d'évaluation	
	14-16 sem	C	TD	TP	Autres			Continu	Examen
UE fondamentales									
UEF (O/P)									
Chimie Organique et Hétéro éléments	67h30	03h	01h30			3	6	x	x
Electrochimie	45h	01h30	01h30			2	4	x	x
Chimie des complexes métalliques	45h	01h30	01h30			2	4	x	x
Chimie de surface	45h	01h30	01h30			2	4	x	x
UE méthodologie									
UEM (O/P)									
Techniques expérimentales	60h			04h		3	5	x	x
Mathématiques et Informatiques appliquées à la Chimie	45h	01h30		01h30		2	4	x	x
UE découverte									
UED1(O/P)									
Chimie Organométallique	45h	01h30	01h30			1	1	x	x
UE transversales									
UET1(O/P)									
Anglais 1	22h30	01h30				2	2	x	x
UET2(O/P)									
Total Semestre 1	375h					17	30		

2-Semestre 2 :

Unité d'Enseignement	VHS	V.H hebdomadaire				Coeff	Crédits	Mode d'évaluation	
	14-16 sem	C	TD	TP	Autres			Continu	Examen
UE fondamentales									
UEF(O/P)									
Chimie du solide	67h30	01h30	01h30	01h30		3	6	X	X
Chimie de Coordination	45h	01h30	01h30			2	4	X	X
Thermodynamique, cinétique formelle et réelle	45h	01h30	01h30			2	4	X	X
Chimie théorique	45h	01h30	01h30			2	4	X	X
UE méthodologie									
UEM(O/P)									
Méthodes d'Analyses Spectroscopiques	60h	3h	1h			3	5	X	X
Matière2									
UEM2(O/P)									
Thermodynamique statistique	45h	01h30	01h30			2	4	X	X
Matière2									
UE découverte									
UED1(O/P)									
Cinétique chimique	45h	01h30	01h30			1	1	X	X
Matière2									
UED2(O/P)									
Etc.									
UE transversales									
UET1(O/P)									
Anglais 2	22h30	01h30				2	2	X	X
Matière2									
UET2(O/P)									
Etc.									
Total Semestre 2	375h					17	30		

3- Semestre 3 :

Unité d'Enseignement	VHS	V.H hebdomadaire				Coeff	Crédits	Mode d'évaluation	
	14-16 sem	C	TD	TP	Autres			Continu	Examen
UE fondamentales									
UEF1(O/P)									
Matériaux pour l'énergie et l'environnement	67h30	3h	1h30			3	6	X	X
catalyse hétérogène	45h	1h30	1h30			2	4	X	X
Electrochimie appliquée	45h	1h30	1h30			2	4	X	X
Procédés d'extraction à membranes	45h	1h30	1h30			2	4	X	X
Etc.									
UE méthodologie									
UEM1(O/P)									
Caractérisation des surfaces, des interfaces et des solides divisés	60h	3h	1h			3	5	X	X
Matière2									
Modélisation Moléculaire	45h	1h30	1h30			2	4	X	X
Matière 1									
Matière2									
UE découverte									
UED1(O/P)									
catalyse homogène	45h	01h30	01h30			1	1	X	X
Matière2									
UED2(O/P)									
Etc.									
UE transversales									
UET1(O/P)									
Anglais 3	22h30	01h30				2	2	X	X
Matière2									
UET2(O/P)									
Etc.									
Total Semestre 3	375h					17	30		

III - Programme détaillé par matière (1 fiche détaillée par matière)

Intitulé du Master : CHIMIE PHYSIQUE

Semestre 1

UEF 1.1, Matière 1: Chimie Organique et Hétéroéléments

I. Grandes réactions de la fonction carbonyle en synthèse organique : alkylation, aldolisation, la condensation de Claisen, la réaction de Mannich, diazométhane, α -diazocétones, α -bromocétones, Sels de diazoïque et diazoalcanes, ylures et carbanions, chimie de phosphore et de soufre.

Protection et déprotection, - Carbènes, chimie radicalaire

II. Réactions d'oxydation: Oxydations allyliques, Epoxydations, Dihydroxylation, Oxydation des alcools en dérivés carbonylés et carboxyliques, Réaction de Baeyer-Villiger

III. Réduction - Formation de liaisons C-H : Hydrogénations catalytiques (Catalyse hétérogène et homogène), Hydrogénolyse, Action des hydrures - Additions nucléophiles sur C=O et diastéréosélectivité, Règles de Cram et Felkin-Ahn.

IV Etude de la réactivité des composés du phosphore en chimie organique

* **Généralités RMN:**, Energies de liaison, Etats d'oxydation, Chiralité et Acidité

* **Nucléophilie :** Condensation redox de Mukaiyama; Réaction de Vilsmeier; Réaction d'Arbuzov; Réaction de Corey-Fuchs, Réaction de Mitsunobu;

* **Réaction de Wittig :** Mécanisme de la réaction, Sélectivité observée dans la réaction de Wittig, Applications de la réaction de Wittig, Réaction de Wittig et Allylation,

* *Réaction de Horner-Wadsworth-Emmons*

Variation de Still-Gennari, Cyclopropanation de Wadsworth-Emmons,

* **Caractère thiophile,**

* **Réactifs fonctionnalisés**

V- Composés organo silicés

Généralités, Nomenclature, Préparation,

* Stabilisation des carbocations en β : Série aromatique, vinylique, acétylénique, allylique
Formation des dicétones

* Stabilisation des carbocations en α : Oléfination, Epoxysilane, Acylsilane,

* Liaisons silicium-hétéroatome : Protection par un groupe silicium, Potentiels des éthers d'énols silylés, liaison Si-X, Réaction de Tamao.

VI-Composés organo-soufrés Généralités, : Nomenclature, Préparation et réactivité

UEF 1.2, Matière 2 : Electrochimie

1. Introduction relation entre électrochimie et thermodynamique (diagramme E-pH), Généralités sur les réactions d'électrode: tension d'électrode (ddp interfaciale)

2. Processus non faradiques et nature de l'interface électrode solution

3. Processus faradiques et facteurs affectant la vitesse des réactions électrochimiques (cellule électrochimique: galvanique, électrolyse étude (par l'exemple))

4. Cinétique des réactions électrochimiques - Quelques aspects théoriques (interface électrode/solution. Double couche électrochimique Couche (compacte de HELMHOLTZ, Couche diffuse de Gouy-Chapman) - Réaction d'électrode (Transfert de masse, Réactions chimiques, Réactions de surface (à l'électrode) Transfert de charge - Vitesse de réaction et intensité

5. Courbes intensité-potential (exemples : système rapide, système lent) - Etude théorique des courbes $I=f(E)$ (équation de Butler Volmer, Lois de Tafel)

- Equation des courbes $I = f(E)$ en régime de diffusion stationnaire (profil de concentration, 1^{ère} lois de Fick), densité de courant limite de diffusion i_{L} .

6. Méthodes électroanalytiques - Voltampérométrie linéaire - Electrodes indicatrices (électrode à disque tournant (EDT), électrode à goutte de mercure (EGM))

7. Electrochimie appliquée (l'accumulateur électrochimique : fonctionnement et architecture, caractéristiques et critères de performance. Cas des piles : piles salines et alcalines, électrodes à gaz : couple zinc-air et piles à combustibles, etc)

Travaux pratiques :

Titrages potentiométriques ; Etudes des courbes intensité-potentiel ; Colorimétrie ; Polarographie

UEF 1.3, Matière 3 : Chimie des complexes métalliques en solution, des oxydes et hydroxydes des non métaux

1- Chimie des complexes en solutions

Chapitre 1 : 1- Définitions 2- Principaux types de ligands 3- Règles nomenclature, 4- Isoméries et stéréochimies 5- Liaison métal-ligand : théorie du champ cristallin 6- couleur des complexes : théorie des orbitales moléculaires.

Chapitre II : Formation des complexes : complexes labiles et complexes inertes, complexes mono, bi, tri et polymétalliques, constantes de formation et diagrammes de distribution.

Chapitre III. Aspects cinétique et thermodynamique

- Stabilité des complexes, constantes de formation, de stabilité, densité de charges, polarisabilité des cations métalliques, influence et la complexation sur les propriétés des ligands, des potentiels -rédox. Détermination de la stœchiométrie des complexes
- Applications des complexes dans les divers domaines: environnement (dépollution), santé et pharmacie, hydrométallurgie (extraction et séparation de métaux)

2- Oxydes des métaux et non métaux

-Etudes des oxydes des éléments métalliques et non métalliques.

-Classification des oxydes

-Liaisons chimiques des éléments avec l'oxygène -

Hydratation et déshydratation des oxydes.

Caractère acido-basique des oxydes, oxydes basiques, oxydes amphotères, oxydes acides (oxo-acides), monomères et polymères des oxydes des non métaux, silicates et aluminosilicates

Hydroxydes, précipitation, applications,

Séparations sélectives des métaux.

UEF 1.4 Chimie de surface :

Chapitre I : Introduction à la physico-chimie de surface, Surfaces et interfaces : définitions, concepts et critères, Aspect structural de la surface, Aspect topographique de la surface

Interaction des surfaces solides avec le milieu extérieur, Interaction avec les atomes et les ions, Interaction avec les électrons, Interaction avec les photons

Chapitre II : Surface propre et contaminations

Chapitre III : Aspect thermodynamique de la surface Energie de surface et tension, superficielle, angle de contact, définitions, méthodes de mesures, paramètres influençant la mesure (rugosité, température, hétérogénéité de la surface'), hystérésis. Quelques exemples d'applications de la mesure des angles de contact. Ellipsométrie

Chapitre IV : Modification de surfaces

Adsorption physique et adsorption chimique, Modification en solution et structures moléculaires organisées à la surface, Monocouches Langmuir-Blodgett, Monocouches auto-assemblées, Dépôt chimique en phase vapeur (CVD), Micro et nano structuration de surface

Chapitre V :

Analyse texturale et morphologique des matériaux :(1) Principales définitions : état divise état poreux, porosité/distribution de taille de pores, surface spécifique. Exemples de solides, poreux et applications : zéolithes, charbon actif, xerogel/aérogel, mesoporeux aux tensioactifs structurants. Analyse texturale par adsorption physique de gaz : description du phénomène de physisorption - Instrumentation -Exploitation des isothermes d'adsorption et de désorption de gaz par les modèles de Langmuir, BET, BJH, t-plot, Porosimétrie a mercure.

UEM 1.1 Techniques expérimentales (TP)

Un cycle de travaux pratiques réunis dans cette UE permettra d'illustrer, les différentes matières (Electrochimie, chimie inorganique, synthèse organique et Chimie de surface) enseignées au premier semestre

UEM 1.2 : Méthodes Mathématiques et Informatiques appliquées à la Chimie

Modélisation moléculaire

Présentation des méthodes quantiques et empiriques; analyse conformationnelle ; dynamique moléculaire ; applications en chimie bio-organique. *Travaux pratiques* : Exemples de modélisation moléculaire à l'aide d'ulogiciel de modélisation moléculaire Macromodel 7.0.

- Simulation numérique de type Monte-Carlo

Principe de la méthode de Monte Carlo : algorithme de Metropolis - conditions périodiques ; potentiels d'interactions ; ensemble statistique ; mise en oeuvre d'un algorithme de Monte Carlo.

Travaux pratiques : Simulations du méthane dans les ensembles NVT et NpT. Calculs de densité, de pression, d'enthalpie de vaporisation et de la fonction de distribution radiale.

- Traitement d'images

Images numériques scientifiques : acquisition, codage, visualisation, formats, compression, sécurité, sauvegarde, transmission. Traitement d'images : résolution, profondeur, transformations géométriques et rééchantillonnage, seuillage, filtrage spatial et fréquentiel. Illustration par des applications dans le domaine des sciences chimiques. *Travaux pratiques* : Exemples, notamment sur des données de microscopies et microsonde : mesures de dimensions, comptage de particules, analyse chimique

UED 1.1. Chimie Organométallique

Description de la liaison métal –ligand et relations structure propriétés spectroscopiques, Complexes métal-carbonyle,-phosphine, -amine, Complexes à ligand hydrocarboné pi-lié : alcène, diènes, alcyne, allyle, arène, cyclopentadiényle, liaisons L métal-hydrure, -alkyle, -aryle. Activation de la liaison C-H. Complexes à liaison métal-métal. Réactivité des complexes: métal-carbène, - carbyne, -vinylidene, allénylidène. Processus monoélectroniques Exemples de catalyse homogène. chimie Bioorganométallique

Semestre 2

UEF 2.1, Chimie de coordination

Chapitre 1

- Rappels sur les liaisons dans les complexes des métaux du bloc d

1. Théorie de la liaison de valence

2. Théorie du champ cristallin

- Le champ cristallin octaédrique
- Le champ cristallin tétraédrique
- Energie de stabilisation du champ cristallin
- Déformation de Jahn-Teller
- Le champ cristallin carré plan
- Autres champs cristallins

3. Théorie des orbitales moléculaires

- Complexes octaédriques
- Complexes tétraédriques
- Complexes sans liaisons métal-ligand
- Complexes ayant des liaisons métal-ligand

Chapitre 2

- Description des électrons dans les systèmes polyélectroniques
- Les nombres quantiques L et M_L
- Les nombres quantiques S et M_S
- Microétats et terme
- Les nombres quantiques J et M_J

Chapitre 3

Spectres électroniques des complexes des métaux de transition

- Propriétés spectrales
- Absorption de transfert de charge
- Règles de sélection
- Spectres électroniques des complexes octaédriques
- Interprétation des spectres électroniques
- Utilisation des diagrammes d'Orgel
- Utilisation des diagrammes de Racah
- Diagrammes de Tanabe-Sugano
- Preuve de l'existence de liaison métal-ligand covalentes
- Effet néphélauxétique

Chapitre 4

Notions sur les complexes organométalliques des éléments du bloc d

- Introduction
- Types courants de ligands
- Liaisons des ligands alkyles, aryles et apparentés
- Ligands carbonyles
- Ligands hydrures
- Phosphines et dérivés
- Ligands organiques à liaison π No, N_2 et H_2
- La règle de 18 électrons
- Les métaux carbonyles
- Le complexe nitrosyle
- Les complexes de diazote
- Les alkyles –métaux, les carbènes et carbynes
- Les complexes alcènes et alcyne non aromatiques

UEF 2.2, Matière 2: Thermodynamique Chimique

Responsable : **HALEM Nacer**, Professeur

UMMTO, I Introduction

1 - Objectif du cours

2 - Domaines d'application des diagrammes

3 - Rappels sur les états de la matière

II Notions générales

1 - Notion d'équilibre entre phases

2 - Règle ou loi des phases

3 - Règle des segments inverses

4 - Les écarts à l'équilibre

5 - Imprécisions sur les diagrammes

6 - Dénomination des phases

III Les différents types de diagrammes binaires: cas de la diffusion parfaite dans le solide et dans le liquide.

1 - Cas des alliages formant des solutions solides illimitées.

2 - Cas des alliages formant des solutions solides limitées. 3

- Cas des alliages formant un eutectique.

4 - Cas des alliages formant un eutectoïde.

5 - Cas des alliages formant un péritectique.

6 - Cas des alliages formant un péritectoïde.

7 - Cas des alliages formant des phases intermédiaires.

8 - Cas des alliages formant une lacune de miscibilité à l'état liquide.

9 - Cas général des diagrammes d'équilibre.

IV Cas pratique de la diffusion imparfaite : que deviennent les diagrammes d'équilibre?

1 - Cas du diagramme en fuseau

2 - Cas du diagramme eutectique

V Applications des diagrammes d'équilibre

VII Lecture du diagramme des bronzes

1 - Identification des différentes transformations et phases intermédiaires

2 - Diagramme pratique des recuits industriels

3 - Diagramme pratique des alliages bruts de fonderie

UEF 2.3 Chimie du solide

Chapitre I : Structure cristalline et Solutions Solides

I-1- Structure cristalline

I-1- a- Structure cubique centrée

I-1- b- Structure cubique faces centrées

I-1- c- Structure hexagonale compacte

I-1- d- Structure cristalline type : perovskite , diamant,

NaCl..... I-2- Solutions Solides

I-2- a- Solutions solides de substitution primaire

I-2- b- Solutions solides de substitution secondaire ou intermédiaires

I-2- c- Solutions solides d'insertion

I-2- d- Composés définis

Chapitre II : Défauts ponctuels dans les solides : le modèle du cristallin

II-1-Notation Kroger – Vink

II-2-Défauts dans les composés stoechiométriques

II-2-a- défauts de Schottky-Wagner (Défauts de lacune)

II-2-b- défauts de Frenkel (Défaut Interstitiels) II-2-b-

Défauts électroniques ou ionisation intrinsèques

- II-3-Défauts dans les composés non stoechiométrique
- II-3-a- Les oxydes déficitaires en oxygène (ou excès en métal)
 - II-3-a-1- Dans le cas de défauts électroniques localisés et délocalisés
 - II-3-a-2- Dans le cas de défauts d'excès en métal
 - II-3-a-3- Dans le cas de présence simultanée de lacune d'oxygène et des ions métallique interstitiels
- III3-b- Les oxydes déficitaires en métal (ou excès d'oxygène)
 - II-3-b-1- Dans le cas de défauts déficitaire en métal
 - II-3-b-2- Dans le cas de présence d'excès d'oxygène en interstitiels
- II-4- Défaut de substitution
- II-5- Energie de formation des défauts

Chapitre III : Diffusion dans les oxydes

- IV -1- Cinétique de diffusion
- IV -2- La dépendance de coefficient de diffusion
- IV -3- Relation entre mobilité et coefficient de diffusion
- IV -4- Conductivité dans les oxydes

TP sur la synthèse des nano poudres d'oxydes par voie chimique et leurs caractérisations de points de vue propriétés optiques et photocatalytiques.

Des synthèses des nano poudres par voie chimique (sol - gel et co-précipitation) ;

- Exploiter un spectre UV ;
- Déterminer l'énergie du gap (Eg) et application des modèles ;
- Teste photo catalytique pour la dégradation des polluants organiques

UEF 2.4 Chimie théorique:

Fondements de la Mécanique Quantique

Objectifs de l'enseignement :

Expliquer à l'étudiant l'origine de la mécanique quantique, Exposer et appliquer l'équation de Schrödinger à quelques cas simples : le puits de potentiel, l'oscillateur harmonique, l'effet tunnel, les différents postulats de la mécanique quantique, Comprendre la structure électronique des atomes, les termes de couplage de Russell-Sanders, ...

Connaissances préalables recommandées : l'étudiant doit avoir fait au préalable les modules de structure de la matière et d'introduction à la mécanique quantique de 2^{ème} année licence chimie.

Contenu de la matière :

Chapitre I : Origines et principes de la mécanique classique

Rayonnement du corps noir, la relation de de-Broglie, explication d'Einstein de l'effet photoélectrique, ...

Chapitre II : Etude de quelques modèles simples

Particule dans une boîte : boîte infinie, boîte semi-infinie.
Oscillateur harmonique.

Chapitre III : Principes de la mécanique quantique

Enoncés des différents postulats de la mécanique antique : Etat quantique, Propriétés observable (opérateurs, mesure, valeur moyenne), conséquences des postulats de la mécanique quantique.

Chapitre IV : Hydrogène, hydrogénoïdes et systèmes à plusieurs électrons

Hamiltonien de l'atome d'hydrogène
Hamiltonien d'un atome hydrogénoïde
Atomes à plusieurs électrons : principes de la répartition électronique, configuration électronique.

Termes de couplage de Russel-Sanders : termes spectraux, les moments angulaires de spin et orbital.

Mode d'évaluation : Examen + Continu

Références (*Livres et photocopiés, sites internet, etc.*).

UEM 2.1 Méthodes d'Analyses Spectroscopiques

FONDEMENT DE LA SPECTROSCOPIE

I SPECTROSCOPIE ULTRAVIOLET-VISIBLE

- I-1 Introduction
- I-2 Type de bandes d'absorption
- I-3 Techniques et montages
- I-4 Loi de BEER-LAMBERT
- I-5 Origine de l'absorption dans le visible et l'ultraviolet1
- I-6 Les différents types de transitions
- I-7 Règles de Woodward-Fieser
- I-8 Effet hypsochrome et bathochrome

II SPECTROSCOPIE

INFRAROUGE II-1 Introduction

II-2 Absorption infrarouge

- a- Modèle de l'oscillateur harmonique b-
- Molécule réelle
- c- Molécules polyatomiques.
- d- Facteur influençant les fréquences de vibration II-3

Etude des principales bandes caractéristiques

II-4 liaisons d'hydrogène

- a- liaison d'hydrogène intermoléculaire b-
- Liaison d'hydrogène intermoléculaire

II-5 Appareillage

II-6 Application de l'IR à la détermination des fonctions organiques

- Les alcanes ; Les alcènes ; Les alcynes, Composés aromatiques, monosubstitué,
- Alcools et phénols, Ethers, Les cétones, Les aldéhydes, Acides carboxyliques,
- Les esters et lactones, Anhydrides d'acides, Amines

III- LA SPECTROSCOPIE R.M.N

III-1 Introduction

III-2 Principe de la RMN

III-3 Origine du phénomène de RMN

III-4 Niveaux d'énergie nucléaire

III-5 noyaux usuels

III-6 Déplacement chimique

III-7 Blindage des noyaux

- a- Relations empiriques
- b- Couplage spin-spin
- c- Notion d'équivalence

III-8 RMN du carbone ¹³C

IV- SPECTROGRAPHIE DE MASSE

IV-1 Introduction

IV-2 Principe

IV-3 Processus de fragmentation

- a- Ion à nombre d'électrons pair ou impair b-
- Rupture avec réarrangement
- c- Fragmentation rétro Diels-Alder
- d- Réarrangement de Mac Lafferty (réarrangement à 6centres) e-
- Coupure des liaisons avec des réarrangements
- f- Coupure allylique
- g- Coupures en α , β de l'hétéroatomes

IV-4 Détermination d'indice d'insaturation

IV-5 Analyse isotopique (AMAS isotopiques)

IV-6 Règle de l'azote

V- Résonance paramagnétique électronique (RPE) V-1

Introduction

V-2- Principe de la R.P.E

V-3 Principaux paramètres étudiés en R.P.E a-

Le facteur g

La Structure hyperfine

UEM 2.2 Thermodynamique statistique et applications aux systèmes de particules sans interaction

I – Une approche plus générale de la thermodynamique

Les fondements de la théorie

Les différentes distributions, leur équivalence à la limite thermodynamique

Systèmes de particules sans interaction, particules discernables et indiscernables Statistiques de Boltzmann, Planck, Fermi-Dirac et Bose-Einstein

II – Application à la statistique de Boltzmann

Ensembles de particules discernables, système à deux états, application au magnétisme

Le gaz parfait polyatomique, théorème de l'équipartition de l'énergie

III – Quelques exemples d'utilisation des autres statistiques

Rayonnement du corps noir

Introduction au comportement des gaz de bosons et fermions

UED 2.1 Cinétique chimique

1 Importance et intérêt de la cinétique chimique

1.1 Importance pratique

1.2 Intérêt théorique

Vitesse de réaction

3 Facteurs influençant la vitesse des réactions

4 Cas de l'activation thermique

5 Loi de vitesse et ordre de réaction

6 Les réactions élémentaires

7 Les réactions composées

7.1 Réactions en série

7.2 Réactions opposées

7.3 Réactions parallèles ou simultanées

7.4 Cinétique des réactions complexes

8 Mécanismes en chaîne

UET 2.1 Anglais 2

Semestre 3

UEF 3.1: Matériaux pour l'énergie et l'environnement

Objectifs :

L'objectif de ce module est d'introduire les notions principales et les grandeurs relatives à la conversion d'énergie par effets thermoélectriques et l'effet photoélectrique.

Chapitre I : Semi-conducteur et jonction PN

I-1- Semi-conducteur

- I-1- a- Les différents types de semi-conducteurs
- I-1- b- Conduction dans les semi-conducteurs
- I-1- c- Structure hexagonale compacte
- I-1- d- Concentration des porteurs

I-2- Jonction PN

- I-2- a- Formation de la jonction PN
- I-2- b- Courant de diffusion et de saturation
- I-2- c- Jonction PN en court-circuit
- I-2- d- Jonction PN Polarisée en inverse
- I-2- e- Jonction PN Polarisée en direct
- I-2- f- Concentration des charges minoritaires

Chapitre II : Notion de base sur l'énergie solaire photovoltaïque

- II-1- Généralité sur l'énergie solaire
- II-2- Puissance lumineuse et éclairage
- II-3- Principe général d'une cellule photovoltaïque simple
- II-4- Les différents types de silicium utilisés en photovoltaïque
- II-5- Courbe courant-tension d'une cellule
- II-6- Sensibilité spectrale et rendement photovoltaïque

Chapitre III : Conversion et Installation photovoltaïque

III -1- Fonction d'une cellule photovoltaïque

- III -1-a- Caractéristique et paramètres électriques cellule photovoltaïque
- III -1-b- Modèle électrique d'une cellule photovoltaïque
- III -1-c- Les constituants de base d'une structure photovoltaïque
- III -1-d- Les constituants de base d'une structure photovoltaïque
- III -1-e- Les différents types de cellule photovoltaïque
- III -1-f- Stratégies d'amélioration des performances
- III -2- Installation photovoltaïque
 - III -2-a- Constituant d'une installation
 - III -2-b- Conception d'une installation
 - III -2-b- Exemples

UEF 3.2 catalyse hétérogène

1°) La cinétique hétérogène

- a) Origine des vitesses des réactions gaz/solide par la théorie des collisions.
- b) Lois cinétiques des réactions gaz-solides (gazéification, ternissage..)
- c) Réaction dans les solides poreux.

2°) Adsorption des gaz sur les solides.

- a) Origine des vitesses d'adsorption et de désorption par la théorie des collisions.
- b) Adsorption dissociative et non dissociative
- c) Recouvrement et Modèle d'adsorption/désorption (Modèle de Langmuir, Méthode BET)

Application : mesure de la surface spécifique d'un solide

d) Compétition d'adsorption

3°) Cinétique des réactions en catalyse hétérogène

Mécanisme de Langmuir-Hinshelwood et Eley-Rideal

. Réaction catalytique avec compétition d'adsorption.

- Méthodologiques :
- a) Approche des processus d'adsorption et de désorption par la théorie des collisions
- b) Compréhension des facteurs agissant sur la cinétique des étapes d'adsorption et désorption
- c) Compréhension des facteurs impliqués dans les réactions de catalyse hétérogène gaz-solide.

UEF 3.3: Electrochimie appliquée aux matériaux

1. Electrochimie fondamentale
 - 1.1 Rappels sur les systèmes électrochimiques à l'équilibre
 - 1.2 Cinétique électrochimique
 - 1.3 Introduction à la voltammétrie cyclique
 - 1.4 Spectroscopie 'impédance électrochimique
2. Electrochimie appliquée aux matériaux
 - 2.1 Elaboration de matériaux par voie électrochimique (matériaux fonctionnels)
 - 2.2 Application de la cinétique électrochimique à l'étude des processus de corrosion (approche par l'exemple)
 - 2.3 Méthodes d'étude et protection de la corrosion

UEF 3.4: Procédés d'extraction a membranes

I- Extraction liquide-liquide

- Définition et principe de l'extraction L/L

- Loi de distribution, constante de distribution, rendement, facteur de séparation, Systèmes d'extraction, Synergisme, antagonisme, extractants

Applications et exposés

II- Membranes et procédés membranaires- applications- modelisation

Procédés membranaires : différents types de membranes, membranes échangeuses d'ions, dialyse et électrodialyse, principe de la dialyse de Donnan , dialyse acide et basique, influence des paramètres (T°, concentration soluté, etc.) , principe de l'électrodialyse, limites

- colmatages, polarisation de concentration, phénomène d'électro-osmose , Matériaux membranaires , Préparation des membranes, Caractérisation des membranes

III- Transport de soluté à travers les membranes

Principe, Mécanismes de transport , équilibre de DONNAN, Différents types de transport (simple, facilité, couplé), Le co-transport et le contre transport, Vitesse, flux de transport , Modélisation du transport

IV- Applications III- (Exercices et Exposés d'articles)

Séparation et pré- concentration de solutés organiques et inorganiques, recyclage,

UEM 3.1: Caractérisation des solides divisés :

I) Elaboration des couches minces

: Méthodes Physiques

1- Epitaxie par jets moléculaires (MBE)

2- Pulvérisation cathodique

3- Dépôt par ablation Laser

4- Techniques du vide

Méthodes chimiques

5- Dépôt chimique en phase vapeur

- 6- Dépôt électrolytique
- II) Caractérisation des couches minces
 - 1- Caractérisation physicochimique par spectroscopies électroniques de surfaces :
 - a) Spectroscopie des électrons Auger (AES)
 - b) Spectroscopie de photoémission X et UV (XPS et UPS)
 - 2- Techniques de caractérisation structurale :
 - a) Diffraction de RX
 - b) Diffraction des électrons lents (LEED)
 - c) Diffraction des électrons rapides en incidence rasante (RHEED)

UEM 3.2 : Modélisation Moléculaire

Objectifs de l'enseignement

Maîtrise des notions fondamentales de la chimie computationnelle et des logiciels de la modélisation moléculaire.

Connaissances préalables recommandées

Connaissance de base sur : la configuration électronique des atomes, notions fondamentales d'algèbre linéaire (les bases, les groupes, calcul matriciel), les différents systèmes de coordonnées, les principes fondamentaux de la mécanique quantique.

Chapitre 01. Méthodes de Mécanique Moléculaire

Introduction à la Modélisation Moléculaire, Définitions, Energies d'interactions moléculaires, Différents types de champ de forces, Avantages et limites des méthodes de mécanique moléculaire.

Chapitre 02. Méthodes de Mécanique Quantique 1 : Méthode de Hartree-Fock, Méthodes semi empiriques et Méthodes Post-HF.

Méthode de HF (Avantages et limites), Méthodes semi-empiriques (Avantages et limites des méthodes semi-empiriques), Energie de corrélation, Méthodes Post-HF : IC et MP (Avantages et limites).

Chapitre 03. Méthodes de Mécanique Quantique 2: Méthodes de la FTD.

Théorèmes de Hohenberg et Kohn, Formalisme de Kohn-Sham- (KS), Différents types d'approche : LDA, GGA et *m*-GGA, Méthodes hybrides.

Chapitre 04. Méthodes Hybrides MM/QM.

Chapitre 04. Méthodes de Dynamique Moléculaire.

TP (Modélisation Moléculaire): Pour la réalisation des différents TP proposés, on utilise à la fois les méthodes de la mécanique moléculaire et de la mécanique quantique.

Partie 1 : Exploration de la Surface d'Energie Potentielle (SEP)

- 1.1. Single Point Calculation (SP)
- 1.2. Recherche des Extrémums (OPT)
- 1.3. Détermination des Minima et des Maxima (FREQ)
- 1.4. Courbes d'Energie Potentielle (Scan)

Partie 2 : Détermination des Propriétés Moléculaires

- 2.1. Les Orbitales Moléculaires (POP)
- 2.2. Les Grandeurs Thermodynamiques
- 2.3. Les Propriétés Spectroscopiques (IR, Raman et RMN)

UED 3.1 catalyse homogène

-
- Chap. 1 : Propriétés communes aux divers catalyseur : description de surfaces, préparations, mises en forme, types de réacteurs, grandeurs caractéristiques, phénomènes d'adsorption, phénomènes de transfert, les grandes familles de catalyseurs et le type de réactions catalytiques associé.
- Chap. 2 : Les catalyseurs acide-base (isolants) : propriétés, structures, corrélations propriétés acido-basiques et catalyse (alkylation, craquage, etc), sélectivité de forme, exemples en craquage (FCC)
- Chap. 3 : Les catalyseurs métalliques (conducteurs): mise en forme, propriétés métalliques, corrélations, réactions : gaz de synthèse, FischerTropsch,- hydrogénations, pots catalytiques.
- Chap. 4 : Les catalyseurs oxydes (semi-conducteurs) : mise en forme, propriétés métalliques, propriétés, structures, mécanisme redox, rôle de lamorphologie, réactions d'oxydation ménagée pour fabrication des monomères, dépollution(De NOx, hydrodésulfuration).

UET 3.1 Anglais 3

