

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 DE L'ENVIRONNEMENT

Année universitaire : 2016/2017

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									
Chimie de l'eau et Procédés physico-chimiques appliqués à l'environnement	67h30	3h	1h30			3	5	x	x
Electrochimie appliquée à l'environnement	45h	1h30	1h30			3	5	x	x
Pollution des eaux et de l'environnement	45h	1h30	1h30			2	4	x	x
Transfert de matière et de chaleur	67h30	3h	1h30			2	4	x	x
UE méthodologie									
Techniques d'Analyses en Environnement (1)	90h	3h		3h		4	9	x	x
UE découverte									
Eléments de microbiologie et de Biochimie	22h30	1h30				1	2	x	x
Chimie de coordination	22h30	1h30				1	1	x	x
UE transversales									
Total Semestre 1	360h	15h	6h	3h		16	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									
Chimie du sol et les déchets solides	67h30	3h	1h30			3	6	x	x
Procédés biologiques appliqués à l'environnement	67h30	3h	1h30			3	6	x	x
Transfert des fluides	67h30	3h	1h30			3	6	x	x
UE méthodologie									
Techniques d'Analyses en Environnement (2)	67h30	3h		1h30		4	9	x	x
UE découverte									
Chimie organique et Environnement	45h	3h				1	2	x	x
Hydrogéologie	22h30	1h30				1	1	x	x
UE transversales									
Total Semestre 2	337h30	16h30	04h30	01h30		15	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									
L'énergie et l'environnement	45h	3h				2	4	x	x
Pollution et Chimie de l'atmosphère	45h	3h				2	4	x	x
Modélisation et optimisation	67h30	3h	1h30			3	5	x	x
Catalyse et phénomènes de surface	67h30	3h	1h30			3	5	x	x
UE méthodologie									
Sciences Expérimentales	45h			03h		4	9		
UE découverte									
Chimie Informatique	45h	1h30		1h30		1	1	x	x
Analyse numérique	67h30	3h	1h30			1	1	x	x
UE transversales									
Anglais scientifique	22h30	1h30				1	1	x	x
Total Semestre 3	360h	18h	04h30	04h30		17	30		

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

Intitulé du Master : CHIMIE DE L'ENVIRONNEMENT

Semestre : Semestre 1

Semestre 1

UE Fondamentale

1- Chimie de l'eau et Procédés physico-chimiques appliqués à l'environnement

Partie I Chimie de l'eau

Importance – Etat naturel

- Différents types d'eau et leur composition
- Eau de mer
- Eau de rivière et eau de source
- Eau de pluie
- hydro titrimétrie- dureté , potabilité

Constitution et structure de la molécule d'eau

- la molécule HO₂
- activité des doublets non liants (polarité)
- stabilité, liaison et énergie de la liaison
- eau liquide, eau glace, eau vapeur

Propriétés physiques

- eau liquide, structure, importance de la liaison hydrogène (liaisons longue distance)
- eau solide (glace) structure, diagramme d'état.
- Eau vapeur, dissociation de la molécule

Propriétés chimiques -Auto-dissociation

de l'eau -Equilibre glace-eau sous pression

- Propriétés oxydantes de l'eau liquide
- Propriétés oxydantes de l'eau vapeur
- Propriétés réductrices
- Réactions d'hydrolyse - Réactions d'hydratation
- Hydrates de gaz - Hydrates de sels
- Hydratations des ions (enthalpies d'hydratations) - Actions sur les anhydrides et les oxydes
- Propriétés catalytiques -Eau résiduaire, composition - eaux d'origine urbaine
- Eaux d'origine industrielle

Caractéristiques des eaux :

- 1) normes sur les eaux potables
- 2) les effluents d'usines d'épuration.

Chimie des solutions.

- 1) Système carbonate.
- 2) Solutions tampons.

PARTIE II PROCÉDES PHYSICO-CHIMIQUES APPLIQUÉS A

L'ENVIRONNEMENT Traitement des eaux par procédés physiques et chimiques:

- 1) coagulation,

- 2) floculation
- 3) décantation
- 4) osmose inverse
- 5) désinfection,
- 6) stabilisation,
- 7) oxydation
- 8) précipitation.

2- Electrochimie appliquée à l'environnement

Chapitre I : Thermodynamique des réactions électrochimiques

I. Rappel des notions d'électrochimie (réaction électrochimique, système électrochimique, double couche électrochimique, potentiel électrochimique)

II. Tension d'électrode

III. Tension absolue d'électrode (Electrode de 1^{ère}, 2^{ème} et 3^{ème} espèce)

IV. Tension relative d'électrode

V. Tension relative de référence

VI. Tension thermodynamique d'un couple

redox VII. Relation de Nernst

VIII. Calcul de quantités thermodynamiques (Constante d'équilibre, Energie libre, Entropie et Enthalpie)

IX. Mesure du potentiel d'électrode

Chapitre II : Electrochimie appliquée 1 : Diagrammes d'équilibres potentiel – pH I. Définition

II. Construction des diagrammes

II.1. Conditions d'utilisation et convention

thermodynamiques II.2. Convention de tracé selon Pourbaix

II.3. Lignes d'équilibres

III. Applications

III.1. Etablissement du diagramme potentiel-pH de

l'eau III.2. Etablissement du diagramme potentiel-pH

du fer III.3. Exploitation du diagramme E-pH

III.4. Domaines de stabilité des espèces du fer dans l'eau

III.5. Etablissement du diagramme potentiel-pH de l'argent

IV. Diagramme E-Px

Chapitre III : Electrochimie appliquée 2 : Corrosion des matériaux

I. Phénomène de corrosion

I.1. Définition

I.2. Les différents processus de corrosion

II. Les facteurs de la corrosion

II.1. Influence du milieu

II.2. Influence de l'état de surface

III. Différents types de corrosion humide

III.1. Corrosion généralisée ou uniforme

III.2. Corrosion localisée :

IV. Corrosion électrochimique

IV.1. Pile de corrosion

IV.2. Potentiel de corrosion

Chapitre IV : Cinétique électrochimique

- I. L'électrolyse et les lois de Faraday
- II. Polarisation et les courbes de polarisation
- III. Théorie de la cinétique électrochimique
 - III.1. Transfert de charge pur
 - III.2. Transfert de masse
 - III.3. Régime mixte transfert de charge-diffusion
 - III.4. Chute ohmique
- IV. Application des cinétiques électrochimiques à la corrosion
 - IV.1. Mesure de la vitesse de corrosion par immersion
 - IV.2. Mesures électrochimiques de la vitesse de corrosion
 - IV.2.1. Extrapolation des droites de Tafel
 - IV.2.2. Mesure de la résistance de polarisation

Chapitre V : Electrochimie appliquée 3 : Protections contre la corrosion

- I. Introduction
- II. Les différents types de protection
 - II.1. Protection naturelle
 - II.2. Protection artificielle
 - II.3. Protection chimique
 - II.4. Protection par revêtements métalliques
 - II.5. Protection électrochimique (Protection cathodique et protection anodique)
 - II.6. Protection par inhibiteur

Chapitre VI : Electrochimie appliquée 4 : Méthodes de dépollution et d'analyses

- I. L'électrochimie et l'environnement
 - I.1. Oxydation des polluants
 - I.2. L'électrocoagulation
 - I.3. L'électrodéposition
 - I.4. L'électrolyse et l'électro-électrolyse
- II. L'électrochimie et les énergies renouvelables
 - II.1. La pile à combustible à hydrogène
 - II.2. La biopile
 - II.3. La pile photovoltaïque électrochimique
- III. Les techniques électrochimiques d'analyse
 - III.1. Les capteurs électrochimiques
 - III.2. La potentiométrie
 - III.3. La voltamétrie à balayage linéaire
 - III.4. Les courbes de dosage
 - III.5. La coulométrie
 - III.6. La polarographie
 - III.7. La spectroscopie d'impédance électrochimique

3- Pollution des eaux et de l'environnement

Partie I : Environnement : Pollution, Protection & Droit

- Terminologie
- Le concept environnement
- L'homme et l'environnement
- Pollution de l'environnement
 - o Pollution d'origine humaine
 - o Pollution d'origine naturelle

- Types de pollutions
 - Pollution de l'air
 - Pollution des sols
 - Pollution de l'eau
- Protection de l'environnement
- Droit de l'environnement
 - Objectifs de la législation sur l'environnement
 - Directives et règlements internationaux

- Audit environnemental
- Connaissances du droit par les scientifiques et les ingénieurs
- Législation sur les produits chimiques
- Recommandations
- Législation sur le transport des produits dangereux

Partie II : L'eau : Aspects fondamentaux & pollution

Chapitre I : L'eau : aspects fondamentaux

- Propriétés physiques de l'eau
- L'eau sur Terre et dans l'Univers
- Origine de l'eau sur Terre
- Présence d'eau dans l'Univers
- Les formes de l'eau sur Terre
- Cycle de l'eau
- Utilisations de l'eau
- Situation mondiale
- Les conséquences sanitaires
- Situation en Algérie
- Comment satisfaire la demande croissante en eau

Chapitre II : Eau potable

- Définition :
- Non potabilité de l'eau
- Production d'eau potable
- Traitement des eaux potables
- Exemple de traitement d'eau de surface : barrage de keddara
- Le dessalement d'eau de mer

Chapitre III : les eaux usées et leurs traitements

- Les différents types d'eau usée
 - Les eaux usées domestiques
 - Les eaux pluviales
 - Les eaux industrielles
- Le système d'assainissement collectif des eaux usées
- Caractéristiques de la pollution des eaux usées
- Phénomène d'eutrophisation
- Evaluation de la pollution
 - Echantillonnage
 - Paramètres physiques
 - Paramètres chimiques
 - Paramètres biologiques
- Traitement des eaux usées
- Traitement primaire
- Traitement secondaire

- Traitement tertiaire :

Partie III : l'air et le sol

Chapitre I : La pollution atmosphérique

- L'air
- La pollution de l'air ou pollution atmosphérique
- Origines de la pollution atmosphérique
- Impact de la pollution atmosphérique sur la santé
- Les polluants atmosphériques

Chapitre II : la pollution du sol

- Composition du sol
- Origine de la pollution du sol
- Nature des polluants du sol
- Effets de la pollution
- Les déchets urbains
- Mesures contre la pollution
- Normes et réglementation en matière de protection des sols

4- Transfert de Matière et de Chaleur

Partie A Transfert de Matière

- Concentration, vitesse et flux.
- Loi de Fick.
- Diffusivité des gaz et des liquides.
- Distribution de la concentration en régimes stationnaire et transitoire. Équations de variation pour les systèmes à plusieurs composants. Transfert de matière entre phases.
- Transfert de matière par convection.
- Introduction aux équipements de transfert de matière.
- Travaux pratiques

Partie B "Transferts thermiques"

- Généralités sur les transferts de chaleur
- Transfert de chaleur par conduction
- Transfert de chaleur par rayonnement
- Transfert de chaleur par convection
- Les échangeurs de chaleur
- Métrologie thermique
- Travaux Pratiques

UE Méthodologie

1- Techniques d'Analyses en Environnement (I)

Spectrométrie d'absorption

Généralités

- Rappels sur les radiations électromagnétiques
- Absorption de la lumière par la matière
 - Aspect théorique
 - Aspect pratique

Colorimétrie ou Spectrophotométrie d'absorption de la Lumière visible

- Introduction
- Causes de l'absorption
- Aspect pratique :
 - Aspect qualitatif
 - Aspect quantitatif
 - Appareillage
- Applications
 - Exemples d'analyses
 - Remarques
 - Spectrophotométrie Ultraviolette
- Introduction
- Absorption de l'U.V par les molécules de transitions électroniques
 - Transition $\Pi \rightarrow \Pi^*$
 - Transition $n \rightarrow \Pi^*$
- Aspect pratique
- Appareillage
- Echantillon
- Applications
- Exemples d'études U.V
- Analyse quantitative

Fluorimétrie

- Introduction
- Appareillage
- Phénomènes d'inhibition
- Phénomènes internes
- Phénomènes externes
- Applications

Spectrométrie Infrarouge

- Principe
- Le spectre I.R
- Enregistrement
- Interprétation
- Etude I.R de quelques composés organiques
- Les composés aromatiques
- Les dérivés carbonyles
- Les associations par liaison hydrogène
- Applications de

L'I.R Spectrométrie de masse

- Principe
- Appareillage
- Introduction de l'échantillon
- Ionisation, Séparation des ions
- Détection, Pouvoir de résolution, Le spectre
- Etudes des ions, Ion moléculaire
- Ions isotopiques formule brute
- Ions métastables
- Fragmentation, Règles générales, Fragmentation de quelques composés

SPECTROSCOPIE DE RESONANCE MAGNETIQUE NUCLEAIRE (RMN):

- Principe
- Interaction spin/ champ magnétique pour un noyau
- Noyaux étudiés par spectroscopie RMN, Déplacement chimique, Couplage spin-spin
- Le spectre RMN, Séquences particulières-découplage de spin
- Spectroscopie RMN du proton, du carbone et du phosphore
- RMN quantitative

UE Découverte

1- Eléments de Biochimie et Microbiologie Générale

Partie A : Eléments de microbiologie

Notions de microscopie.

- Étude de la morphologie, de la nutrition et de la culture des bactéries. Classification des microorganismes.
- Introduction à la microbiologie des microorganismes eucaryotes et à la virologie.
- Quelques applications pratiques sont vues en laboratoire: microscopie, activités et contrôle des microorganismes,
- Techniques expérimentales (analyse de l'eau, de l'air et du sol)

Partie B : Eléments de Biochimie

- propriétés et fonctions des constituants cellulaires,
- génétique,
- métabolisme,
- transport membranaire.
- Cinétique enzymatique et microbienne.
- Écologie microbienne.
- Applications industrielles.

2- CHIMIE DE COORDINATION

LIAISONS, SPECTRES ET MAGNETISME

1. Nomenclature des composés de coordination

2. Liaisons dans les composés de coordination

a) *Théorie de la liaison de valence*

b) *Théorie du champ cristallin*

* Effets du champ cristallin : symétrie octaédrique.

* Energie de stabilisation du champ cristallin

* Facteurs influant l'énergie de stabilisation du champ cristallin

* Applications de la théorie du champ cristallin

c) *Théorie des orbitales moléculaires*

* Liaisons π dans la théorie des orbitales moléculaires

d) *Spectres électroniques des complexes*

* Diagrammes de Tanabe-Sugano

* Déformations tétraogonales de la symétrie octaédrique

* Spectres de transfert de charge

* Ligands dont la couleur est produite par des transitions de transfert de charge

3. Propriétés magnétiques des complexes

STRUCTURES DES COMPLEXES

- a) Coordinence 1
- b) Coordinence 2
- c) Coordinence 3
- d) Coordinence 4 : Complexes carrés plans
- e) Coordinence 5
- f) Propriétés magnétiques et spectroscopiques
- g) Coordinence 6
- * Déformation de l'octaèdre parfait
- * Isométrie géométrique dans les complexes octaédriques
- * Isométrie optique
- * Mécanisme de substitution dans les complexes octaédriques

COMPLEXES EN

- SOLUTION h) Stabilité
- a) Constante de formation.
 - b) Facteurs stabilisants.
 - c) Caractères des complexes

Semestre 2

UE Fondamentale

1- CHIMIE DU SOL ET LES DECHETS SOLIDES

Partie A : pollution du sol

Sols contaminés.

- 1) Contaminants naturels et xénobiotiques
- 2) interactions physico-chimiques contaminant-sol.
- 3) Caractérisation des sols aspects légaux.

Techniques de restauration des sols et eaux souterraines.

Traitement in situ

- 1) biopiles de sol
- 2) bioréacteurs
- 3) bioaugmentation.

Métabolisme microbien, et méthodes expérimentales de détermination du taux de biodégradation.

Facteurs environnementaux, processus d'une étude de faisabilité

Partie B : Déchets Solides

Traitement des déchets solides ou assimilés

- 1) Propriété des déchets
- 2) Traitements thermiques des déchets :
 - Prétraitement des déchets avant traitement thermique
 - Combustion à l'air – Incinérateur
 - Oxycombustion :
 - Oxydation haute température (Bordeaux)
 - Oxydation par oxyde métallique (en développement)
 - Oxydation par voie humide (OVH)
 - Pyrolyse
 - Solvolyse

- Gazéification
- Produits gazeux issus des traitements thermiques
- Post-traitement thermique
- Traitements des fumées
- Traitement biologique des déchets :
- 1 Principe général
- Métabolismes énergétiques
- Le compostage
- Méthanisation
- . Autres traitements

1) Stabilisation – solidification des déchets

- Considérations préalables
- Objectifs des procédés d'inertage
- Inertage à base de liants hydrauliques
- Généralités
- Réaction d'hydratation
- Déchets minéraux
- Déchets organiques ou mixtes
- Mécanismes – Déchets minéraux
- Mécanismes – Déchets organiques ou mixtes
- Tests de fiabilité
- Tests Physiques
- Tests chimiques
- Inertage/ Enrobage à l'aide de liant organique
- Vitrification
- Perspectives

4). Centres d'enfouissement technique (CET)

- choix du site d'implantation
- Dangers et risque d'un CET
- Système de sécurité active
- Matériaux
- Conception
- systèmes de couverture
- Collecte et traitement des lixiviats
- collecte et traitement des biogaz :

2- PROCÉDES BIOLOGIQUES APPLIQUES A L'ENVIRONNEMENT

- Les inconvénients des procédés chimiques
- Les procédés biologiques et l'environnement
- Rôle des microorganismes dans l'environnement

- Les microorganismes et la croissance cellulaire
- Définition des microorganismes
- Application des microorganismes dans les procédés ed traitement
- La croissance cellulaire
 - Définition de la croissance cellulaire
 - Les facteurs de croissance
 - *Les substrats nutritifs (carbonés et azotés)*

L'énergie
L'eau
La température
Le pH
L'oxygène
Les ions inorganiques
L'adaptation

La croissance des populations bactériennes
 La croissance sur milieu solide
 La croissance sur milieu liquide
 La culture en batch
 La culture en continu

La croissance diauxique
Les différentes méthodes de mesure de la croissance
Les différentes phases de croissance
Les limitations de la croissance

La modélisation
 Les cinétiques de croissance cellulaire en cultures discontinues (batch)
 Les cinétiques de production de métabolites
 Production associée à la croissance (métabolites primaires)
 Production non associée à la croissance (métabolites secondaires)
 Production partiellement associée à la croissance
 Les cinétiques de consommation de substrats *Loi de MONOD Rendements*

3- Transfert des Fluides

- 1 Introduction
- 1.1 Définition :
- 1.2 Liquides et gaz :
- 1.3 Forces de volume et forces de surface.
- 2 STATIQUE DES FLUIDES
- 2.1 La grandeur PRESSION :
- 2.2 Principe Fondamental de la Statique des Fluides
- 3 TENSION SUPERFICIELLE
- 3.1 Le phénomène
- 3.2 La force de tension superficielle
- 3.3 Tube capillaire - loi de Jurin
- 3.4 Mesurages de tension superficielle
- 4 DYNAMIQUE DES FLUIDES INCOMPRESSIBLES
- 4.1 DEFINITIONS :
- 4.2 Ecoulements PERMANENTS OU STATIONNAIRES :
- 4.3 EQUATION DE CONSERVATION DE LA MASSE ou EQUATION DE CONTINUITÉ
- 4.4 CONSERVATION DU DEBIT MASSE :
- 4.5 EQUATION DE CONSERVATION DE L'ENERGIE
- 4.6 RELATION DE BERNOULLI GENERALISEE
- 5 VISCOSITE
- 5.1 Introduction :
- 5.2 Définition de la viscosité dynamique – Loi de Newton :
- 5.3 Viscosité cinématique :
- 5.4 Influence de la température :
- 6 DYNAMIQUE DES FLUIDES VISQUEUX INCOMPRESSIBLES
- 6.1 Rappels : Les différents régimes d'écoulement nombre: de Reynolds

- 6.2 Visualisation de l'écoulement
- 7 CALCUL des PERTES de CHARGE
- 7.1 PERTES DE CHARGE ACCIDENTELLES
- 7.2 PERTES DE CHARGE SYSTEMATIQUES
- 7.3 Annexe :
- 8 THEOREME d'EULER
- 8.1 Introduction :
- 8.2 Théorème d'Euler :
- 8.3 Application du théorème d'Euler :
- 9 LES POMPES
- 9.1 Introduction
- 9.2 Limitation de la hauteur manométrique d'aspiration - NPSH (1) ; Cavitation
- 9.3 Caractéristiques
- 10 Courbe de réseau

UE Méthodologie

TECHNIQUES D'ANALYSES EN ENVIRONNEMENT (II)

La Chromatographie

- Introduction
- Bases théoriques
- La chromatographie sur couche mince (C.C.M)
- Technique spéciale de travail
- Nouveau procédé: le derivapress
- La chromatographie en phase liquide à haute performance (H.P.L.C)
- Principe
- Phase stationnaire
- Phase mobile
- Détecteurs
- Applications à la biotechnologie
- La chromatographie en phase gazeuse (C.P.G)
- Principe
- Les colonnes
- Les injecteurs : Injecteur Split/Splitless, Injecteur Direct ; Injecteur vaporisateur programmable en température (PTV)
- Etc.
- Les détecteurs : Détecteur à Ionisation de Flamme(FID) , Détecteur à Conductivité thermique (TCD) , Détecteur thermoionique (FTD) , Détecteur à capture d'électron (ECD) , Détecteur photométrique à flamme , Spectromètre de masse (SM), Résonance Magnétique Nucléaire (RMN), Différentspesty de couplages, Application
- Analyse Bactériologique de l'eau
- Analyse biochimique

UE Découverte

Hydrogéologie

1. Introduction

- 1.1. l'eau sur la Terre

- 1.2. Hydrogéologie et disciplines connexes
- 2. Rappels hydrologiques : cycle de l'eau et bilans
 - 2.1. cycle de l'eau
 - 2.2. bilans hydrologiques et hydrogéologiques
 - 2.3. eaux superficielles
 - 2.3.1. Précipitations, évapotranspiration
 - 2.3.2. méthodes de détermination (Thorntwaite, Turc, Serra)
 - 2.3.3. relations hydrologie et hydrogéologie
 - détermination du débit de base
 - courbes de tarissement
- 3. Eaux souterraines
 - 3.1. porosités en roches meubles et cohérentes
 - 3.2. types d'eaux dans les sols
 - 3.3. mouvements des eaux souterraines
 - 3.3.1. zone insaturée (pm)
 - 3.3.2. frange capillaire (pm)
 - 3.3.3. zone saturée - loi de Darcy
 - 3.3.3.1. rappel
 - 3.3.3.1.2. conductivités hydrauliques des différentes roches
 - 3.3.4. surfaces piézométriques dans leur contextegéologique
- 4. Nappes aquifères
 - 4.1. condition d'existence d'une nappe aquifère - aquitard - aquiclude
 - 4.2. types de nappes - géologie
 - 4.2.1. classifications
 - 4.2.2. relations lithologie - nappes
 - 4.2.3. exemples
 - 4.3. ressources en eaux souterraines en Belgique
 - 4.4. cartes hydrogéologiques
- 5 Eléments d'hydrogéochimie
 - 6.1. Introduction
 - 6.2. Unités
 - 6.3. Qualité des eaux souterraines
 - 6.4. Normes et réglementations
 - 6.5. Représentations graphiques des compositions chimiques des eaux (Schöller, Piper, Stiff ...)
- 6. Captages - adductions - réglementations

Travaux pratiques :

 - identification et caractérisation des nappes phréatiques sur cartes géologiques
 - types, réserves, sens écoulement,
 - qualité (diagrammes hydrogéochimiques)
 - prévention
 - reconnaissances

Semestre 3

UE Fondamentale

1- CATALYSE ET PHENOMENES DE SURFACE

Partie A

- Les interfaces gaz-liquide et liquide-liquide
- L'interface gaz-solide
- L'interface solide-liquide
- Catalyse homogène
- Catalyse hétérogène
- Electrocatalyse et environnement

Partie B

1. TENSIOACTIF EN SOLUTION AQUEUSE : *Notions sur les phénomènes d'adsorption, de micellisation et de solubilisation .*

- Généralités sur les phénomènes de surfaces
Thermodynamique des phénomènes de surfaces.
 - Méthodes de mesures de la tension interfaciales
 - Adsorption aux interfaces ; micellisation des tensioactifs dans l'eau effet hydrophobe
 - Concentration micellaire Critique.
 - Le HLB Balance hydrophile/lipophile
 - Applications liées à la structure de la solution
 - Applications liées à l'interface Solution – Solvant
 - Pouvoir Détergent
 - Récupération tertiaires du pétrole.
- #### 2. RÉACTIVITÉ EN MILIEU DISPERSÉ
- Micellisation en milieu aqueux
 - Introduction aux émulsions et colloïdes
 - Stabilité colloïdales
 - Exemples de réactions en milieu dispersée

2- Modélisation et Optimisation (PLANS D'EXPERIENCES)

I- Notions de statistiques

- Vocabulaire de base : population, unités statistiques, variable aléatoire
- Statistiques de la population : moyenne, variance, écart-type, distribution

II- Généralités sur les plans d'expériences

- Objectifs
- Facteurs, domaine expérimental et réponses
- Variables réduites, matrice d'expériences, plan d'expérimentation
- Démarche méthodologique

III- Importance de la MRE : exemples des pesées

IV- Criblage de facteurs

- Définition
- Hypothèses de base
- Matrices de criblage : les matrices de Hadamard
Détermination du nombre d'expériences
Construction de la matrice
Variance des coefficients

- Les outils d'aide à l'interprétation

Méthode de Lenth

Normal plot et Half-plot

Approche de Paréto

V- Etude quantitative des facteurs

- Matrices d'expériences factorielles complètes 2^k
 - Notions d'interaction
 - Construction de la matrice d'expériences
 - Modèle mathématique
 - Détermination des effets principaux et des interactions
 - Interprétation des résultats à travers un exemple
- Matrices d'expériences factorielles fractionnaires 2^{k-r}
 - Notion d'alias
 - Générateurs indépendants, relation de définition
 - Hypothèses d'interprétation
 - Calcul de

Box VI- Initiation aux surfaces de réponses

- Matrices d'expériences utilisées pour :
 - Modèle polynomial du 1^{er} degré
 - Modèle polynomial du 2^{ème} degré
- Qualités prévisionnelles du modèle mathématique
- Matrices d'expériences composites
- Matrices d'expériences de Box-Behnken
- Matrices d'expériences de Doehlert
- Recherche des conditions optimales : Analyse canonique et chemin optimal

UE Découverte

1- CHIMIE INFORMATIQUE

Chapitre 1. Introduction à la théorie des orbitales moléculaires

1. Approximation de la particule indépendante
2. Des orbitales atomiques aux orbitales moléculaires .

Chapitre 2. Théorie des orbitales moléculaires de Hückel

1. Introduction
2. Définition d'un système conjugué
3. Orbitales moléculaires π du butadiène dans l'approximation de Hückel.
4. Analyse des OMs de Hückel: Energie électronique π , indices de liaisons, charges électroniques et charges atomiques nettes, distance interatomiques.
5. Etude de molécules avec hétéroatomes : formaldéhyde, méthanimine, propène,
6. Etude de molécules cycliques : cyclopropène, cyclobutadiène.
7. Formules de Coulson pour les polyènes linéaires etcycliques.
8. Energie de délocalisation et énergie de résonance.
9. Aromaticité et anti-aromaticité : de Hückel et de Dewar
10. les alternants.

Chapitre 3. Introduction à la réactivité par la théorie des orbitales frontières.

1. Introduction : notion d'orbitales frontières
2. Les constantes de vitesse et d'équilibre
3. Stabilité thermodynamique

4. stabilité cinétique

Chapitre 4. Réactivité des systèmes conjugués

1. Introduction : problème des réactions sans mécanisme.
2. Réactions électrocycliques
3. Réactions de transpositions sigmatropiques
4. Réactions de cycloaddition.

TP (Chimie Informatique):

Partie 0 : Introduction aux méthodes de la chimie Informatique

0.1. Méthodes de Mécanique Moléculaire

0.2. Méthodes de Mécanique Quantique

0.2.1. Méthodes de HF et Post_HF

0.2.2. Méthodes de la DFT

0.2.3. Méthodes semi-empirique

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)

2- ANALYSE NUMERIQUE

Introduction

- 1) Essai de définition de l'analyse numérique
- 2) Analyse numérique et l'ordinateur
- 3) Fondement des méthodes numériques

Résolution des équations non linéaires

Recherche de l'optimum d'une fonction d'une seule variable

- 1) Principales méthodes de recherche unidimensionnelle
- 2) Transformations élémentaires d'une matrice

Résolution des systèmes d'équations linéaires – méthodes directes

- 1) Méthodes sans pivotation
- 2) Méthodes avec pivotation

Résolution des systèmes d'équations linéaires. Méthodes itératives

- 1) Méthode de Jacobi
- 2) Méthode de Gauss-Seidel
- 3) Méthode de relaxation.
- 4) Résolution des systèmes linéaires par méthode d'optimisation.

Approximation de données numériques par des fonctions analytiques- méthode des moindres carrés.

3-ANGLAIS SCIENTIFIQUE

1. Expression Ecrite
2. Rédaction de texte scientifique.
3. Traduction de texte scientifique.

