Catalogue des cours sélectionnés

1 : Chimie Organique
2 : De l'atome à la molécule
3 : Introduction à la chimie moléculaire
4 : Bases théoriques de la chimie analytique
5 : Chimie du solide
6 : Thermodynamique Physico-Chimique
7 : Synthèse Organique
8 : Matériaux sur mesure
9 : Chimiométrie
10 : Etats colloïdaux et biomolécules
11 : Techniques Moléculaires de Caractérisation
12 : Liaison chimique
13 : Liquides Colloïdaux
14 : Frontières de la chimie
15 : Réactivité
16 : Opérations unitaires du génie chimique
17 : Physique des incendies pour l'ingénieur
18 : Cristallographie, diffraction et symétries
19 : Conception de procédés
20 : Energies : réalité et perspectives
21 : Option Génie chimique
22 : Thermostatistique
23 : Gastronomie Moléculaire
24 : Les fondations de la chimie moléculaire
25 : Chimie inorganique avancée
26 : Modélisation moléculaire
27 : Sciences Analytiques et Bioanalytiques
28 : Energie, réduction et mofication de la consommation
29 : Synthèse des Polymères
30 : Synthèse Approfondie et Chimie Verte
31 : Chimie et Matériaux Inorganiques
32 : Identification de Composés Organiques

Chimie Organique

Le cours de Chimie Organique vise à donner à tous les étudiants les bases essentielles dans cette discipline. Ces bases, bien assimilées, leur permettront de disposer des outils conceptuels indispensables quelles que soient leurs futures orientations (chimiques ou biologiques et même physiques).

Contenu
Généralités
Nomenclature
Hybridation
Stéréochimie
Chiralité des molécules organiques
Configurations absolues (convention CIP), configurations relatives appliquées en particulier aux acides aminés et aux sucres, convention D/L
Principe des réactions énantiosélectives et diastéréosélectives
Mécanismes réactionnels
Effet inductif, effet mésomère
Acidité et basicité en Chimie Organique
Contrôle cinétique et thermodynamique des réactions
Réactions de substitution, d'élimination et d'addition
Réaction de substitution électrophile aromatique
Réactions électrocycliques
Etude des groupes fonctionnels
Amines et alcools
Alcènes et alcynes
Aldéhydes et cétones
Acides et dérivés
Préceptorat
Révisions de classes préparatoires, nomenclature
Effets électroniques, acides et bases, groupements protecteurs
Aldéhydes et cétones, première partie
Aldéhydes et cétones, seconde partie
Enols, énolates et énones
Acides carboxyliques et dérivés d'acides, révisions
Travaux pratiques
Les objectifs de ce module expérimental de 5 semaines sont l'apprentissage des différentes techniques de mise en œuvre d’une réaction, de son suivi analytique, puis de la vérification de la structure des composés obtenus. Les étudiants se familiarisent avec l'utilisation de bases de données informatiques (Reaxys, Scifinder...), logiciels de simulation de spectres RMN 1H et 13C (Chemdraw), et consultent des publications scientifiques en ligne. L'accent est aussi mis sur l'apprentissage de l’autonomie, la mise en œuvre des bonnes pratiques de laboratoire en respectant les règles de sécurité et la tenue d’un cahier de laboratoire à la manière d’un chercheur. Enfin, les étudiants sont sensibilisés à une chimie plus respectueuse de l’environnement (éco-compatible ou chimie verte).
La réalisation de 16 manipulations différentes permet à la fois d’approfondir le cours et d’expérimenter de nouvelles techniques générales comme la

distillation fractionnée sous vide, la manipulation sous atmosphère inerte, la synthèse multi-étapes ou encore les synthèses enzymatiques et sous micro-ondes. C’est aussi l’occasion d’analyser les conditions expérimentales utilisées et de discuter le mécanisme des réactions étudiées grâce à une présentation préalable par un binôme d’étudiants. Les méthodes d’analyse classiques des produits synthétisés (mesure des températures de fusion, d'ébullition et du pouvoir rotatoire, chromatographie sur couche mince), sont complétées par des méthodes d’analyse spectroscopiques telles les RMN 1H et 13C, l'IR et les chromatographies CPG-masse et en phase supercritique (sur colonne chirale, détermination de l'excès énantiomérique). Au cours de la dernière semaine, les étudiants doivent mobiliser leurs connaissances et leur esprit déductif afin d’identifier la structure d’un composé inconnu qui leur est distribué accompagné de différents spectres (RMN 1D et 2D, masse, IR). C’est aussi une très bonne illustration du module d’Identification des Composés Organiques.
Quelques manipulations réalisées :
Réaction de Knoevenagel
Cyclisation biomimétique du citronellal en isopulégol
Réduction énantiosélective par la levure de boulanger
ynthèse multicomposants d’un imidazole par activation sous micro-ondes

Niveau requis
Chimie niveau mathématiques spéciales PC* ou équivalent

Modalités d'évaluation
Examen écrit, questions de cours et problèmes de réflexion

Période : Automne
Nombre d'heures : 116
Crédits ECTS : 9
École : École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la Ville de Paris
Dernière mise à jour : jeudi 21 mars 2013

De l'atome à la molécule

Basé sur une description électronique et orbitalaire de la molécule, ce cours apporte les éléments indispensables à la compréhension de différentes propriétés des matériaux. Les orbitales moléculaires de systèmes chimiques simples seront construites à l'aide d'outils issus de la mécanique quantique (C.L.O.A, méthode Hückel). Ce cours permettra d'aborder différentes applications de la connaissance des orbitales moléculaires d'un système tant en chimie qu'en ce qui concerne les propriétés physico-chimiques des molécules. Enfin, nous verrons que ces raisonnements peuvent être étendus à la compréhension de phénomènes macroscopiques avec une extension aux propriétés des matériaux qui sera développée en fin de cours.

De l'atome à la molécule

Niveau requis
bases de mécanique quantique

Modalités d'évaluation
examen écrit

Période : Automne
Nombre d'heures : 20
Crédits ECTS : 2
École : École Nationale Supérieure de Techniques Avancées
Dernière mise à jour : lundi 14 décembre 2009

Introduction à la chimie moléculaire

L'objectif du cours est de donner à des élèves n'ayant pas eu de formation poussée en chimie les bases nécessaires à une compréhension des réactions étudiés en chimie organique ainsi que le vocabulaire utilisé pour décrire ces transformations.

Ce cours introduit les fondations théoriques de base permettant de décrire la structure et la réactivité des molécules organiques. L'ambition principale de ce cours est de montrer qu'au moyen d'une approche théorique simple, la théorie des orbitales moléculaires, il est possible d'expliquer la géométrie préférentielle des molécules ainsi que la nature des transformations qu'elles subissent lorsqu'elles sont mises en présence de réactifs de natures différentes.

L'objectif du cours est de donner à des élèves n'ayant pas eu de formation poussée en chimie les bases nécessaires à une compréhension des réactions étudiées en chimie organique ainsi que le vocabulaire utilisé pour décrire ces transformations. Les élèves doivent avoir acquis à la fin de ce cours les connaissances leur permettant de suivre le cours long de chimie (CHI431) ou bien les contenus chimiques des enseignements de biologie.

A cette fin, le cours est divisé en sept chapitres dont les contenus sont succinctement décrits dans la liste ci-dessous.

Chapitre 1 : Structure Electronique de l'Atome
1. Description Quantique de la Matière
2. Notion d'Orbitale Atomique : L'Atome d'Hydrogène
3. Atomes Polyélectroniques : Règles de Remplissage
4. Evolution des Propriétés dans la Classification Périodique

Chapitre 2 : Structure Electronique des Molécules
1. Rappels sur la Structure de Lewis des Molécules
2. Géométries des Molécules : Méthode VSEPR

3. Approximation de Born-Oppenheimer
4. Notion d'Orbitale Moléculaire : Méthode CLOA
5. Principe de Construction d'un Diagramme d'OM
6. Exemples d'Application

Chapitre 3 : Groupes Fonctionnels en Chimie Organique
1. Les Fonctions de la Chimie Organique
2. Les différents types d'isomérie
3. Analyse Conformationnelle.
4. Influence électronique des substituants : effets inductifs, mésomérie, hyperconjugaison

Chapitre 4 : Notions de Mécanismes Réactionnels
1. Notion de Surface d'Energie Potentielle
2. Théorie de l'Etat de Transition
3. Réactions de Substitution Nucléophile
4. Réactions de Substitution Electrophile
5. Réactions d'Addition Nucléophile

Chapitre 5 : Approche Orbitalaire de la Réactivité
1. Théorie des Orbitales Frontières
2. Contrôle de Charge vs. Contrôle Orbitalaire
3. Basicité vs. Nucléophilie
4. Exemples d'application

Chapitre 6 : Système Conjugués
1. Méthode de Hückel
2. Formules de Coulson
3. Aromaticité
4. Luminescence

Chapitre 7 : Réactions Péricycliques
1. Electrocyclisations
2. Cycloadditions
3. Contrôle de la sélectivité
4. Influence d'un catalyseur

Références bibliographiques :
Introduction à la chimie moléculaire par Eric Olaf Clot
Structure électronique des molécules : de l'atome aux molécules simples par Y. Jean et F. Volatron
Structure électronique des molécules : géométrie, réactivité et méthode de Hückel par Y. Jean et F. Volatron
Frontier orbitals and organic chemical reactions par Ian Fleming

Niveau requis
Il n'y a aucun pré-requis pour ce cours qui s'adresse uniquement aux élèves ayant fait peu de chimie dans leur parcours ; ce cours est un pré-requis obligatoire pour suivre le cours long de CHI431.

L'accès au cours de CHI411 est fermé aux élèves issus de la filière PC.

Période : Automne
Nombre d'heures : 36
Crédits ECTS : 5
École : École Polytechnique
Dernière mise à jour : lundi 24 octobre 2011

Bases théoriques de la chimie analytique

- Introduction à la mécanique quantique
Dans ce cours, proposé par Hervé This, le problème de l'atome d'hydrogène est formulé en termes d'équations aux dérivées partielles. Il s'agit d'une première approche qui précède un formalisme mathématique plus général introduit ensuite dans le cours de mécanique quantique pour construire le modèle.

- Cours de mécanique quantique
Proposé par Christian J. Ducauze et Hervé This, ce cours montre l'efficacité du formalisme mathématique introduit par Heisenberg et Schrödinger pour construire le modèle théorique et pour être en mesure de l'appliquer ensuite, en particulier à l'étude de spectres. Il illustre ainsi le fait qu'un modèle est bâti à partir d'observations expérimentales et validé parce qu'il permet de les prévoir.
Un premier chapitre d'introduction générale replace dans son contexte historique le modèle de la mécanique quantique, tel qu'il est ensuite présenté dans les 5 chapitres suivants.

- Approche chimiométrique des résultats d'une analyse
Ce chapitre de cours, proposé par Christian J. Ducauze et Arlette Baillet-Guffroy, est une réflexion sur le trajet qu'il faut suivre pour élaborer une donnée analytique à partir des résultats d'une analyse. Il constitue une excellente initiation à la pratique de la chimiométrie.

- Choix et validation d'une méthode d'analyse
Dans ce chapitre, Christian J. Ducauze, Arlette Baillet-Guffroy et Thanh X. Bui présentent les principaux critères sur lesquels on peut fonder le choix d'une méthode d'analyse, puis l'étude à mener pour être en mesure de valider la méthode choisie et de mettre en place un contrôle interne de la qualité des analyses.

- Optimisation de la collecte des données
Christian J. Ducauze et Thanh X. Bui présentent dans ce chapitre quelques-unes des stratégies possibles pour collecter des données, en insistant plus particulièrement sur l'intérêt de la méthodologie des plans d'expériences, sur son fondement théorique et sa mise en œuvre pratique.

- Introduction à l'étude des méthodes spectrométriques
Proposé par Christian J. Ducauze et Arlette Baillet-Guffroy, ce cours rappelle quelques bases théoriques utiles à la compréhension des méthodes spectrométriques.

- Spectrométries de l'atome
Ce cours, proposé par Christian J. Ducauze, Hervé This et Thanh Xuan Bui, est une introduction à l'étude des spectrométries atomiques. Dans le prolongement du cours de mécanique quantique, il montre

comment déterminer les niveaux énergétiques d'un atome, les transitions énergétiques possibles entre ces niveaux et prévoir ainsi l'allure du spectre atomique obtenu.

- Spectroscopies moléculaires : spectres électroniques et spectres de vibrations
Proposé par Christian J.Ducauze, Arlette Baillet-Guffroy et Douglas N. Rutledge, ce cours est une introduction à l'étude des spectroscopies de la molécule. Il insiste tout particulièrement sur leurs principes, montre l'intérêt de chacune et donne quelques indications sur sa mise en œuvre.
Les spectrométries UV Visible et infrarouge sont essentiellement abordées mais aussi, plus succinctement, les spectrométries de fluorescence, de phosphorescence et la spectrométrie Raman.

- Résonance magnétique nucléaire
Ce cours de Résonance Magnétique Nucléaire (RMN) est proposé par Christian J. Ducauze et Douglas N. Rutledge, avec la participation de Hervé This pour le troisième chapitre (RMN 3) qui constitue une application du cours de mécanique quantique, démontre la validité de cette théorie et prouve l'efficacité du formalisme mathématique choisi pour prévoir un spectre de RMN.
Le premier chapitre (RMN 1) présente le modèle théorique qui été élaboré pour donner une interprétation du phénomène de résonance magnétique nucléaire, le deuxième chapitre (RMN 2) essayant quant à lui de faire brièvement comprendre la richesse de l'information chimique contenue dans un spectre.

Contenu détaillé :

- Introduction à la chimie analytique : concepts, démarche et méthodes
  (C.J. Ducauze) 2 h

- Mécanique quantique
- Introduction à la mécanique quantique (H. This) -4 h
- Cours de mécanique quantique (C.J. Ducauze et H. This) 8 h

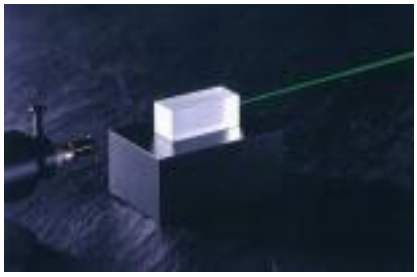
- Chimiométrie
- Approche chimiométrique des résultats d'une analyse (C.J. Ducauze et A.Baillet-Guffroy) 1 h 30
- Choix et validation d'une méthode d'analyse (C.J. Ducauze, A.Baillet-Guffroy et T.X. Bui) 3 h
- Optimisation de la collecte des données (C.J. Ducauze et T.X. Bui) 3 h

- Spectrométries
- Introduction à l'étude des méthodes spectrométriques (C.J. Ducauze et A. Baillet-Guffroy) 1 h 30
- Introduction à l'étude des spectrométries de l'atome : niveaux énergétiques de l'atome et transitions permises (C.J. Ducauze, H. This et X.T. Bui) 1 h 30
- Spectroscopies moléculaires : spectres électroniques et spectres de vibrations (C.J. Ducauze, A. Baillet-Guffroy et D.N. Rutledge) 3 h

- Résonance magnétique nucléaire
- Concepts de base en RMN (C.J. Ducauze et D.N. Rutledge) 6 h
- La spectrométrie de RMN (C.J. Ducauze et D.N. Rutledge) 3 h
- Etude et calcul de quelques spectres de RMN (C.J. Ducauze, D.N. Rutledge et H. This) 3 h

Période : Automne
Nombre d'heures : 40
Crédits ECTS : 5
École : AgroParisTech
Dernière mise à jour : vendredi 05 novembre 2010

Chimie du solide



Le présent enseignement donne, dans une première partie, de prime abord une description des caractères structuraux des différents solides ioniques. La thermodynamique de formation de ces solides est ensuite présentée. Des repères historiques, relatifs à la conception des différentes échelles de rayon ionique, sont mentionnés. Des modèles, justificatifs de l'écart au modèle ionique parfait, sont décrits, suivi de la théorie du champ cristallin ainsi que de ses conséquences thermodynamiques, structurales et magnétiques

Le modèle du solide cristallin sera progressivement complété par l'introduction des imperfections ou défauts qui existent dans tous les solides réels. C'est l'ensemble cristal (Parfait + défauts) qui constituera le modèle du solide réel. Ce modèle du cristal réel fait l'objet de la seconde partie, de cet enseignement.

Cet enseignement n'a d'autre objectif que de permettre à l'étudiant d'acquérir les connaissances suivantes:

1 - Savoir décrire les principaux types structuraux caractérisant les solides
2 - Savoir calculer et interpréter l'énergie de réseau d'un solide
3 - Savoir utiliser l'échelle des rayons ioniques selon Shanon et Prewitt pour mieux comprendre la structure du solide
4 - Savoir décrire un des modèles représentatifs de l'écart au modèle ionique parfait du solide
5 - Avoir une très bonne connaissance des conséquences liées à l'existence du champ cristallin dans un solide
6 - Savoir distinguer les différents types de défauts dans un solide
7 - Pouvoir écrire le mécanisme de formation d'un défaut dans un solide non stoechiometrique
8 - Pourvoir prévoir les propriétés physico-chimique en corrélation avec la formation des défauts dans le solide

Partie A : Les solides cristallisés, du modèle ionique au composé ionocovalent

1. Caractères structuraux des solides ioniques

    a) Rappel de la description des empilements compacts : cfc, hc

    b) Les solides ioniques de type MX

    c) Les solides de type MX2

    d) Relations structurales entre réseaux compacts MX, MX2 et cations en coordinence 4 ou 6

2. Caractères structuraux de solides plus complexes

a) Les composés de type MO3

b) Les composés de type AMO3

c) Les composés de type AM2O4 de type spinelle

3. Thermodynamique de formation des solides ioniques

a) Calcul de l'énergie réticulaire. Constante de Madelung

b) Relation de Kapustinkii

c) Détermination de l'énergie réticulaire à partir des cycles thermochimiques

4. Relation entre structure et rayon ionique

Le rayon ionique. Les différentes échelles

5. Ecarts au modèle ionique parfait

a) Le modèle de Sanderson ou modèle des charges partielles

b) Les diagrammes de Mooser-Pearson

c) Effet des électrons d : Théorie du champ cristallin

Partie B : Défauts ponctuels dans les solides : le modèle du cristal réel

I- Composées stœchiométriques

1- Défauts intrinsèques. Mécanisme de formation des défauts

2- Défauts neutres et chargés. Notion de charges effectives

3- Règles d'écriture des réactions de formation des défauts

4- Thermodynamique de formation et équilibre des défauts

II- La non stœchiométrie dans les composés – mécanismes de formation de défauts

1- Justification de la non stœchiométrie

2- Composés déficitaires en anions

3- Composés déficitaires en cations

4- Annihilation de défauts – plans de cisaillement : WO_{3-x}, MoO_{3-x}

III- Les solutions solides: substitution dans les solides, dopage

1- Substitution par un ion de même valence : Al_2O_3-Cr_2O_3

2- Substitution par un ion de valence inférieure

3- Substitution par un ion de valence supérieure

4- Les phénomènes d'ordre et désordre: $LiFe_5O_8$, Ni_2GeO_4

IV- Propriétés optiques des solides. Conducteurs ioniques. Piles à électrolytes solides

1- les centres colorés

2- les conducteurs ioniques

3- Les piles à électrolyte solides

Niveau requis
L2

Modalités d'évaluation
Examen écrit sans document

Période : Printemps
Nombre d'heures : 24
École : Chimie ParisTech
Dernière mise à jour : vendredi 14 janvier 2011

Thermodynamique Physico-Chimique

L'objectif du cours est de montrer comment utiliser le cadre très général et formel de la thermodynamique pour prédire le comportement et l'évolution d'un système chimique formé de molécules, de particules et d'interfaces, dans lequel peuvent se produire des phénomènes de mélange, de séparation, des réactions, des changements d'états, ou des processus de transport. Le cours se veut un aller - retour continu entre les potentiels et les grandes relations thermodynamiques et leur déclinaison en termes microscopiques. Le lien avec le cours de thermodynamique statistique se fait par la prise en compte de la complexité interne des molécules.Il n'est pas prévu d'activités de laboratoire, mais l'enseignement expérimental de Thermodynamique fait abondamment appel aux notions du cours.

Contenu
Un premier module introduit la diversité des états moléculaires et particulaires de la matière (gaz, liquide, solide, matière molle, matière en grains) et les outils pour la caractériser: potentiel de paire, fonctions de corrélations. Les grandes classes de forces intermoléculaires et de forces de surface sont passées en revue.Le second module est un rappel des notions et relations thermodynamiques de base (phases, potentiels thermodynamiques, grandeurs molaires partielles, potentiel chimique, conditions d'équilibre, relation de Gibbs-Duhem...), dans un contexte élargi par la prise en compte des phénomènes de surface et d'interface.Le troisième module concerne les solutions -liquides ou solides- et les mélanges. En partant de la solution idéale et ses propriétés (tension de vapeur, pression osmotique...), on évolue progressivement vers des situations plus complexes impliquant des molécules ou particules en interaction. La démarche consiste à mener en parallèle une approche thermodynamique et un modèle statistique (Bragg-Williams pour les solutions régulières; Flory-Huggins pour les solutions de polymères; Debye-Hückel pour les solutions d'électrolytes).Un quatrième module concerne les équilibres, les transformations, les séparations et les diagrammes de phases. La stabilité est analysée dans le cadre général du développement d'un potentiel thermodynamique et dans la cadre particulier du modèle des solutions régulières. Les deux mécanismes de séparation que sont la nucléation - croissance et la décomposition spinodale sont abordés.Le cinquième module concerne les systèmes dans lesquels se produisent des réactions chimiques. Le coeur du module est la description des constantes d'équilibres et de l'affinité en termes de fonctions de partitions moléculaires.Le dernier module est une introduction à la thermodynamique linéaire des processus irréversibles: vitesse de production d'entropie, phénomènes de transport, couplages, application au génie des procédés chimiques et à la biologie.

Travaux pratiques
Travaux pratiques communs aux cours de Thermodynamique Statistique et de Thermodynamique Physico-Chimique.

Période : Hiver & Printemps
Nombre d'heures : 28
Crédits ECTS : 2
École : École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la Ville de Paris
Dernière mise à jour : lundi 15 avril 2013

Synthèse Organique

Que ce soit au travers des médicaments, parfums, de la cosmétique, des matériaux, la Chimie organique fine est partout. Connaître les bases de la synthèse organique est essentiel pour un chimiste.Cet enseignement s'adresse aux chimistes et vise à les initier, par l'exemple, aux nouvelles réactions utilisées en synthèses organique. Ce travail trouve son application dans l'étude de grandes synthèses de produits biologiquement actifs. Ces études constituent de surcroît une première approche relative aux stratégies de synthèse en Chimie Organique.

Contenu
Réactions d'alkylation
Formation des carbanions par déprotonation
Formation régiosélective des énolates. Conditions cinétiques et thermodynamiques
Stéréochimie des énolates (Z, E)
Alkylation des énolates et des dianions (Nature de l'agent alkylant, RX donnant C-alkylation, O-alkylation avec silylation et acétylation)
Utilisation des éthers d'énol silylés (lithien ? monoalkylation)
Conditions d'alkylation des esters (énolate E), amides (énolate Z), et nitriles
Action des nucléophiles carbonés sur le groupement carbonyle.
Alkylation en milieu basique
Formation et hydrolyse des énamines
Réactions de condensation des énamines (régiosélectivité)
Aldolisation, Robinson
Réaction de Mannich
Réaction de Knoevenagel
Acylation des carbanions: réaction de Claisen, cyclisation de Dieckmann
Intermédiaire réactifs: imidazole d'acyle
Additions conjuguées: réaction de Michael, réaction de Sakurai, éther d'énol silylé (Mukaiyama)
Préparation des ?-cétoesters, réactif de Mander (CNCO2Me)
Transformation d'ester en cétone
Réactions de Wittig et de Wittig-Horner, Peterson
Ylures de soufre nucléophiles
Réaction de Darzens.
Interconversion des groupes fonctionnels
Halogénures et esters sulfoniques à partir des alcools
Effets de solvant
Formation des nitriles, des azides (réaction de Mitsunobu)
Alkylation des amines et des amides
Nucléophiles oxygénés: réaction de Mitsunobu sur les alcools
Nucléophiles soufrés
Groupes protecteurs (ROTHP, ROSiR3, ROBn, ROMe), formation et déprotection
Rupture des liaisons C-O d'esters et d'éthers (TMSI, BBr3, H2 pour OBn)
Interconversion des dérivés des acides carboxyliques: réactifs pour l'acylation (imidazoles, chlorures d'acides). Préparation d'esters (DCC), et d'amides à partir d'esters, de nitriles, de chlorures d'acides. Formation de cétènes suivie du piégeage (COCl +NEt3)

Additions électrophiles sur les doubles liaisons. Oxydations et Réductions, Métathèse.
NBS, PhSeCl, Hg(OAc)2, iodolactonisation
Organoboranes, formation d'amines à partir d'organoboranes.
Réduction : Diimide, LAH-NaBH4 et réduction des amides en amines NaBH3CN, Dibal-H, n-Bu3SnH (Barton). Métaux dissous, Clemmensen, Wolf-Kishner Réaction de Shapiro
Oxydation : Swern, PCC et PDC comparés, Dess-Martin, oxydation allylique par SeO2. Formation de cétones ???-insaturées à l'aide de PhSeCl et PhSSPh, OsO4, Bayer-Villiger.
Coupure oxydante des diols
Intermédiaires réactifs
Réarrangements des carbocations : réarrangement pinacolique, cascades de Johnson.
Agrandissement de cycle par CH2N2.
Fragmentation de Grob. Transposition de Favorski
Les réarrangement d'Hofmann, de Schmidt, de Curtius et de Beckman
Réaction de Métathèse et applications
Préceptorat
Basés sur l'étude approfondie de quelques grandes réactions intégrées dans des synthèses multistades :
Alkylations, additions nucléophiles carbonés sur la double liaison C=O
Additions nucléophiles carbonés (suite), interconversion de groupes fonction-nels, métathèse
Additions électrophiles sur les doubles liaisons, oxydations et réductions
Intermédiaires réactifs, révisions

Période : Hiver & Printemps
Nombre d'heures : 21
Crédits ECTS : 3
École : École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la Ville de Paris
Dernière mise à jour : jeudi 02 mai 2013

Matériaux sur mesure

L'objectif principal du cours, orienté vers la conception, est d'illustrer l'évolution actuelle du monde des matériaux qui, d'un stade où il s'agissait d'utiliser au mieux la matière disponible -que ce soit du bois ou un supraconducteur-,évolue vers un stade où le matériau est conçu pour les propriétés recherchées.
L'inscription des propriétés dans la composition et la structure du matériau se fait à toutes les échelles et amène le matériau à fonctionner de plus en plus comme une machine, un système ou un dispositif.
L'inscription des propriétés -qu'elles soient structurales ou fonctionnelles- au plus intime du matériau ne résulte pas seulement du choix des composants. Dans pratiquement tous les cas, les propriétés finales du matériau sont inséparables du procédé qui a permis d'élaborer l'objet qui sera utilisé. Présent à des degrés divers dans tous les modules, ce couplage matériau-procédé sera particulièrement illustré dans certains d'entre eux.
Enfin, bien que cela n'apparaisse pas explicitement dans l'intitulé du cours, de nombreux exemples traités relèvent du domaine des nanotechnologies et des nanomatériaux.

Contenu
Cette option est placée dans le cadre de la chaire Sciences des Matériaux et Surfaces Actives mise en place conjointement par Saint-Gobain, l'ESPCI et l'Ecole Polytechnique.Les thèmes abordés sont :
Physique et chimie des matériaux
Propriétés massiques des matériaux (électronique, catalyse,)
Mise en forme des matériaux et engineering de surface (PVD, CVD, sol- gel, texturation…)
Surfaces actives
Optique des couches minces
Propriétés mécaniques (fractures, frottement, …)
Mouillage et adhésion
L'option comprend 7 conférences et une visite d'une usine Saint-Gobain. Chaque conférence couvre deux aspects :
un aspect "socle de connaissances " : compréhension des mécanismes
un aspect " "connaissances à la frontière" : nouveaux matériaux, nouvelles fonctionnalités, avancées scientifiques
Conférenciers 2013
Erich Wimmer (Materials Design). Electronic structure calculation in industrial context.
C. Weisbuch (UC Santa Barbara). The revolution of LEDS for lighting.
W. Poon (Univ. Edinburgh). How to use concepts in physics of colloids for elaboration of ceramics
M. Wuttig (Univ. Aachen). A new class of exciting materials: phase change materials for rewritable optical data storage.
A. Popoff (St Gobain Recherche). Les coatings industriels.
M. Van Damme (Ecole des Ponts ParisTech). Mechanics and physics of porous solids.
T. Graule (EMPA Switzerland). Ceramic based nanomaterials for application in photocatalysis, filtration technology and fuel cell research.

Période : Hiver & Printemps
Nombre d'heures : 30
Crédits ECTS : 3
École : École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la Ville de Paris
Dernière mise à jour : mercredi 01 mai 2013

Chimiométrie

Le cours a pour objectif l'acquisition des outils chimiométriques nécessaires à la construction rationnelle d'expériences et permettant une exploitation optimale des résultats. Une attention particulière est apportée aux relations entre les conclusions statistiques, leur interprétation physico-chimique et les conséquences pratiques qui en découlent.

Contenu
ANOVA (Analyse de la Variance) à un facteur contrôlé
Principe et utilité

Tests statistiques
Tableau d'ANOVA et interprétation
Etudes de cas
La régression linéaire
Principe et utilité
Statistiques de la régression
Hyperboles de confiance et de prédiction
Adéquation du modèle
Etudes de cas
Les plans d'expériences
Principe et utilité
Plans factoriels 2n
Significativité des effets
Plans factoriels fractionnaires 2n-p et de criblagePlans pour surface de réponse

Niveau requis
Cours de Statistiques Appliquées

Modalités d'évaluation
Examen écrit d'une durée d'une heure et demie.

Période : Hiver & Printemps
Nombre d'heures : 11
Crédits ECTS : 1
École : École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la Ville de Paris
Dernière mise à jour : mardi 19 mars 2013

Etats colloïdaux et biomolécules

Les biotechnologies et la biophysique font un large usage des colloïdes. La bioanalyse et l'imagerie, par exemple, utilisent les colloïdes comme marqueurs, la biophysique les utilise afin de manipuler mécaniquement des structures biologiques. La reconnaissance spécifique entre colloïdes greffés par anticorps et par antigènes est la base de diagnostics biologiques (ELISA…).
Le cours décrit d'abord les principes associés à cette reconnaissance spécifique. Il donne ensuite un aperçu de ces applications et autres applications potentielles dans le domaine de l'immunodiagnostic. Il évoque finalement l'élaboration de matériaux biomimétiques.

Contenu
Reconnaissance spécifique: généralités et définitions
Durée de vie d'un assemblage et paysage d'énergie
Formation d'un assemblage, cas à 2 et 3 dimensions
Application au diagnostic biologique

Application à la micromécanique des filaments

Période : Hiver & Printemps
Nombre d'heures : 12
Crédits ECTS : 3
École : École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la Ville de Paris
Dernière mise à jour : mardi 23 avril 2013

Techniques Moléculaires de Caractérisation

Cet enseignement a pour objectif de donner aux étudiants les bases nécessaires pour acquérir une bonne maîtrise des outils de caractérisation. Il couvre la description des spectroscopies d'absorption infrarouge et UV-visible, de diffusion Raman et d'émission de fluorescence ainsi que de résonance magnétique nucléaire.

Contenu
Spectroscopie vibrationnelle (absorption Infrarouge et diffusion Raman): (7 h de cours + 5 h de TD + 3 h de préceptorat, L. Bokobza) Etude des spectres de vibration-rotation des molécules diatomiques [règles de sélection qui régissent les transitions en absorption et en diffusion; conséquences, sur les spectres, de l'anharmonicité des vibrateurs; paramètres moléculaires qui peuvent être déduits de l'analyse des spectres].Vibrations des molécules polyatomiques: traitement en mécanique classique et en mécanique quantique.Application de la théorie des groupes à la spectrométrie de vibration: détermination de l'activitédes vibrations en absorption infrarouge et en diffusion Raman à partir de leurs propriétés de symétrie. Introduction à la spectrochimie: justification de l'existence de fréquences caractéristiques de groupes d'atomes à l'aide de modéles mécaniques simples et méthodes d'attribution des spectres d'absorption infrarouge. Spectroscopie proche-infrarouge: potentiel de cette technique pour la résolution de problèmes analytiques dans des domaines aussi divers que ceux de l'agro-alimentaire, de la pétrochimie ou des polymères.Préceptorat (3h) - Relation entre spectres de vibration et symétrie des molécules- Fréquences de groupes : justification de leur existence à partir de modèles mécaniques - Le vibrateur C=O : paramètres susceptibles de modifier sa fréquence de vibrationSpectroscopie ultraviolette et visible; photoluminescence: (3 h de cours + 2 h de conférences, L. Bokobza) Transitions électroniques des molécules polyatomiques.Dissipation de l'énergie d'excitation par une molécule isolée: conversion interne, fluorescence, croisement intersystème, phosphorescence, désexcitation non-radiatives. Considérations cinétiques: durées de vie, rendements quantiques.Effets des interactions avec le solvant et entre chromophores.Mécanismes d'inhibition de la fluorescence.Exemples d'utilisation des sondes de fluorescence dans les milieux polymères et micellaires ainsi que dans les protéines et les membranes biologiques.Applications de la microspectroscopie de fluorescence à la biologie. Résonance Magnétique Nucléaire: (8 h de cours + 3 h de TD + 3h de préceptorat, A. Trokiner) Introduction: Effet Zeeman, populations à l'équilibre, aimantation nucléaire; référentiel

tournant, introduction à la relaxation.Aspects expérimentaux : le signal RMN et la Transformée de Fourier, aspects quantitatifs, mesure des temps de relaxation T1 et T2. Expériences RMN en conditions extrêmes.Les interactions : interactions dipolaire, de déplacement chimique, de couplage scalaire et interaction quadrupolaire.Retour sur la RMN des liquides et solutions. RMN dans les matériaux solides : effet d'anisotropie sur les interactions, méthodes spécifiques aux solides : rotation à l'angle magique (M.A.S.) et polarisation croisée. Aspects expérimentaux.IRM: principe de l'imagerie par transformée de Fourier; codage de l'espace, types d'images, images pondérées par les temps de relaxation T1 et T2. Préceptorat (3h) - Relaxation spin-spin dans un polymère-Imagerie par RMN
Travaux pratiques
Les travaux pratiques sont consacrés à l'analyse de structures de petites molécules mais également de polymères. Ils visent à faire acquérir la maîtrise de l'instrumentation et des conditions expérimentales pour une optimisation de la réponse spectroscopique. Ils visent aussi à coupler les techniques moléculaires à des techniques plus macroscopiques telles que des mesures rhéologiques pour une meilleure compréhension du comportement des polymères. Spectroscopie vibrationnelleAnalyse de spectres infrarouges de molécules simples.Utilisation de l'absorption infrarouge (moyen et proche) ainsi que de la diffusion Raman pour l'analyse de spectres de polymères.Structures fines de gaz et détermination de paramètres moléculaires. Simulation de spectres infrarouges sur ordinateur d'espèces réactionnelles et comparaison avec les spectres expérimentaux.Absorption UV-visible et émission de fluorescenceInfluence du micro-environnement sur l'émission de fluorescence d'un fluorophoreUtilisation de cet outil spectroscopique pour la caractérisation des propriétés d'association des polymères et couplage à des mesures de viscosité. RMN de polymèresMesures de temps de relaxation T1 et T2 par RMN 1H Application à l'étude de la dynamique de chaînes polymères à caractère associatif en solution et de polymères massifs à l'état caouthoutique. Effet de la température.Comparaison de l'échelle des mouvements sondés par RMN à celle sondée par des mesures rhéologiques.

Période : Hiver & Printemps
Nombre d'heures : 82
Crédits ECTS : 6
École : École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la Ville de Paris
Dernière mise à jour : jeudi 02 mai 2013

Liaison chimique

Introduction à la chimie quantique

Partie I : de l’atome d’hydrogène à la molécule

1. L'atome d'hydrogène
1.1. Solution de l'équation de Schrödinger pour H
1.2. Les orbitales hydrogénoïdes

2. Plus d'électrons : l'atome d'hélium
2.1. Le théorème des variations et l'atome d'hélium
2.2. La méthode des perturbations pour les états non dégénérés
2.3. La corrélation électronique comme perturbation dans l'atome d'hélium
2.4. Le spin, le principe de Pauli et les déterminants de Slater

3. Les atomes polyélectroniques
3.1. La méthode de Hartree auto-cohérente
3.2. La méthode de Hartree-Fock

4. Plus d'électrons et d'atomes : les molécules
4.1. L'approximation de Born-Oppenheimer
4.2. Unités atomiques
4.3. La molécule la plus simple : H2+
4.4. La méthode LCAO-MO
4.5. Fonctions d'onde, densité électronique et liaison chimique

5. Molécule diatomique
5.1. Molécules homonucléaires : de H2+ à N2
5.2. Un électron en plus : H2
5.3. La méthode VB pour H2
5.4. Les différences entre VB et MO
5.5. Les molécules hétéronucléaires

Partie II : les méthodes d’approximation pour les molécules

6. La symétrie moléculaire
6.1. La théorie des groupes en chimie
6.2. Symétrie et liaison chimique (l'approche SALC)

7. Méthodes approchées
La méthode de Hückel simple et étendue

Partie III : Introduction aux Théories de la Réactivité

8. La méthode HF
8.1. L'hamiltonien moléculaire
8.2. Le déterminant de Slater et les fonctions d'onde mono-électroniques
8.3. L'équation de Roothan-Hall
8.4. Le choix des fonctions de base
8.5. La procédure du champ auto-cohérent (SelfConsistent Field)
8.6. Calcul des propriétés moléculaires

9. Les méthodes post-Hartree Fock
9.1. La corrélation électronique

9.2. La méthode d'interaction de configurations
9.3. Les méthodes perturbatives

Période : Printemps
Nombre d'heures : 28
École : Chimie ParisTech
Dernière mise à jour : vendredi 14 janvier 2011

Liquides Colloïdaux

Les Colloïdes sont des objets de taille intermédiaire (mésoscopique), comprise entre 10-8 m et 10-6 m. Les colloïdes correspondent à un état très divisé de la matière où le rôle des interfaces est prédominant. De tels systèmes sont très courants dans la vie de tous les jours. On peut citer les cas des aérosols liquides (brouillard) ou solides (fumées), les mousses, les émulsions comme le lait, la mayonnaise, les crèmes cosmétiques, les suspensions comme l'encre de Chine, les peintures, les boues de forage, les précurseurs de catalyseurs ou de céramiques. Le champ d'application industriel de ces systèmes est extrêmement diversifié et se caractérise par un couplage étroit entre synthèse, formulation et fonctionnalisation du produit. Les systèmes colloïdaux sont en général des systèmes relativement instables ou l'on observe un équilibre précaire entre différentes forces antagonistes. L'objectif de ce cours est d'introduire ce domaine au niveau de la 3ème année de l'option de chimie. Le but est de présenter les principales classes de colloïdes, de discuter des différentes interactions structurants ces systèmes et d'étudier les principales stratégies de stabilisation et/ou de déstabilisation de ces "phases colloïdales". Ce cours s'appuie et utilise l'acquis d'autres enseignements de l'école dont il fournit des exemples d'application. Il permet d'introduire certains problèmes rencontrés dans les domaines des matériaux, de la chimie de spécialités, de la pharmacie, des cosmétiques, des peintures et revêtements, des liants hydrauliques.

Contenu
Systèmes à l'équilibre
Introduction générale à l'état condensé liquide
Les interactions moléculaires
Les liquides purs et diagramme de phases
Solution de molécules amphiphiles
Tension superficielle et interfaciales des solutions
Mouillage et detergence
Etats métastables
Dispersions
Emulsions
Gels

Période : Hiver & Printemps
Nombre d'heures : 19
Crédits ECTS : 2
École : École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la Ville de Paris
Dernière mise à jour : mercredi 01 mai 2013

Frontières de la chimie

Une série de sujets bibliographiques et/ou pratiques concernant divers domaines de la chimie moléculaire moderne sont proposés en début de cours.
Les élèves choisissent ensuite un sujet et doivent effectuer une recherche bibliographique approfondie ou un projet de recherche au laboratoire, en association avec un des enseignants du département. Dans les deux cas, un rapport écrit sera soumis à la fin du module et présenté oralement.

Période : Printemps
Nombre d'heures : 36
Crédits ECTS : 4
École : École Polytechnique
Dernière mise à jour : mardi 06 avril 2010

Réactivité

Contenu
Méthodes d'analyse
Domaine d'étude
Diagrammes de corrélation
Approximation des orbitales frontières
Applications à la chimie organique
Réactions électrocycliques
Corrélation des OM
Corrélation des états
Réactions de cycloaddition
Approximation des orbitales frontières
Règle d'Alder
Effet endo
Applications à la chimie de coordination
Rappels sur les fragments MLn
Etude de la conformation de ML4(éthylène)
Description des grands types de réaction en catalyse homogène
Addition oxydante de H2
Couplage de carbènes
Préceptorat
Application des méthodes théoriques (diagramme de corrélation et approximation des orbitales frontières à l'étude de la réactivité en chimie organique.
Structure des complexe boryles des métaux de transition.
Etude théorique de la réactivité des nickelacyclopentane.
Structure des complexes borohydrure.

Période : Hiver & Printemps
Nombre d'heures : 13
Crédits ECTS : 1
École : École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la Ville de Paris
Dernière mise à jour : jeudi 02 mai 2013

Opérations unitaires du génie chimique

Les procédés de séparation d'un mélange (solide, liquide ou gazeux) en ses constituants purs sont essentiels dans l'industrie chimique. La méthodologie consiste, à l'aide de une ou plusieurs opérations, à effectuer un transfert de matière par la mise en contact intime de plusieurs phases (S-S / S-L / L-L / L-G / S-G ...).
L'objectif du cours consiste à calculer les bilans matière et énergie de l'unité de séparation étudiée qui peut être de type continue ou discontinue, et être réalisée à co-courant ou à contre-courant.
La démarche pédagogique choisie consiste à détailler la rectification des mélanges liquides qui exploite la différence de volatilité des constituants. Cette opération de séparation est complexe puisqu'elle présente la particularité de mettre simultanément en présence un écoulement, un transfert de matière et un transfert de chaleur.
Les analogies possibles dans la démarche scientifique et la mise en oeuvre permet de présenter plus rapidement d'autres opérations unitaires (absorption, extraction, séchage, évaporation, lavage, filtration, ...).

Cet enseignement a été édité sous forme d'ouvrage.

CHAPITRE I : LES OPERATIONS UNITAIRES

1 – Les procédés industriels
2 – Principes mis en jeu dans les opérations de séparation
3 – Analyse des mécanismes de transfert
4 – Le transfert de matière en milieu biphasique
5 – Conclusion

CHAPITRE II : LES EQUILIBRES LIQUIDE-VAPEUR

1 – Conventions et principes
2 – Diagrammes d’équilibre de phase (P, T, composition)
3 – Equilibre des phases

CHAPITRE III : LA DISTILLATION

1 – Constations expérimentales
2 – Rectification continue – Méthode graphique de Mac Cabe et Thiele
3 – Rectification continue – Méthode graphique de Ponchon et Savarit
4 – Fonctionnement d’une colonne de rectification

5 – Distillation discontinue d'un binaire avec rectification
6 – Comparaison des techniques de distillation
7 – Distillation des mélanges multicomposants
8 – Régulation de la colonne

CHAPITRE IV : L'ABSORPTION

1 – Exemples
2 – Mode opératoire et fonctionnement du procédé
3 – Détermination du nombre de plateaux théoriques
4 – Trace des plateaux théoriques

CHAPITRE V : DIMENSIONNEMENT D'UNE COLONNE

1 – Les contacteurs gaz-liquide
2 – Notion de nombre et hauteur des plateaux théoriques
3 – Etude d'une colonne à garnissage
4 – Détermination de la hauteur de garnissage
5 – Définitions des grandeurs HUT et HEPT
6 – Comparaison des grandeurs NUT et NPT

CHAPITRE VI : EXTRACTION LIQUIDE-LIQUIDE

1 – Principes – Définitions
2 – Exemples d'extraction liquide-liquide
3 – Représentation des mélanges sur les diagrammes ternaires
4 – Les diagrammes de solubilité partielle
5 – Choix du solvant
6 – Courbe de distribution et droites de conjugaison (conodales)
7 – Schéma des procédés d'extraction liquide-liquide
8 – Conclusion

CHAPITRE VII : EXTRACTION SOLIDE-LIQUIDE

1 – Définitions
2 – Exemples d'extraction solide-liquide
3 – Mécanisme d'extraction : étapes du transfert de matière
4 – Représentation des équilibres dans l'extraction solide-liquide
5 – Cas de l'extraction solide-liquide continue

CHAPITRE VIII : CRISTALLISATION INDUSTRIELLE

1 – Définitions
2 – Exemples d'applications
3 – Courbes de solubilité et mode opératoire
4 – Approche phénoménologique
5 – Conclusion

CHAPITRE IX : EXERCICES AVEC SOLUTIONS DETAILLEES

1 – Fonctionnement d’une colonne de rectification avec alimentations et un soutirage intermédiaire
2 – Séparation de l’oxygène et de l’azote de l’air
3 – Etude de la rentabilité économique d’une distillation continue
4 – Calcul de la hauteur d’une colonne d’absorption à garnissage
5 – Extraction de la nicotine (C) en solution dans l’eau (1) par le kérosène (B) à T = 20°C et P = 105 Pa
6 – Purification du zirconium par extraction liquide-liquide avec section de lavage
7 – Extraction solide-liquide en continu à contre courant : extraction de l’huile contenue dans des graines par le benzène
8 – Cristallisation : calcul du profil de refroidissement

Niveau requis
Notions de thermochimie

Modalités d'évaluation
Examen écrit

Période : Automne
Nombre d'heures : 12
École : Chimie ParisTech
Dernière mise à jour : vendredi 14 janvier 2011

Physique des incendies pour l'ingénieur

Connaître des éléments de physique des incendies nécessaires à la compréhension globale des phénomènes et de leurs effets sur les structures. Comprendre les enjeux de sécurité. Acquérir les connaissances de base sur les principales parties "feu" des Eurocodes Structuraux pour permettre le dimensionnement des structures au regard de leur comportement au feu.

1. Sécurité incendie et Eurocodes
a. Approche globale en ingénierie de sécurité incendie
b. Présentation générale des Eurocodes "matériaux"
c. Propriétés thermo mécaniques
2. Les enjeux de sécurité
a. Besoins des pays industrialisés
b. Notions de schéma de sécurité - application à la sécurité incendie
c. Les réglementations : pourquoi ? pour qui ?
d. Introduction à l'harmonisation européenne
i. Règlement "produits de construction"
ii. Diversité des approches réglementaires des états membres
3. Phénomènes du feu et sollicitations thermiques
a. Phénomènes de transfert de matière et d'énergie
b. Modélisation des sollicitations thermiques
c. Actions en cas d'incendie (Eurocode 1 - partie 1.2)
i. Actions thermiques : incendies localisés et généralisées, pour éléments de structures internes ou

externes
ii. Exemples d'applications
4. Comportement au feu des structures en béton (Eurocode 2 - partie 1.2)
a. Valeurs tabulées pour murs, planchers, poutres, poteaux, tirants,
b. Méthodes de calculs simplifiées
c. Exemples d'application
5. Comportement au feu des structures en acier (Eurocode 3 - parties 1.2)
a. Températures critiques, résistance ultime à températures élevées
b. Echauffement des profils protégés ou non, internes ou externes aux bâtiments
c. Exemples d'application
6. Comportement au feu des structures mixtes (Eurocode 4 - partie 1.2)
a. Valeurs tabulées pour planchers, poutres, poteaux,
b. Méthodes de calculs simplifiées
c. Exemples d'application
7. Comportement au feu des structures bois (Eurocodes 5 - partie 1.2)
a. Carbonisation
b. Méthode de calcul simplifiée
c. Assemblages
d. Exemples d'application
8. Exemples de calculs avancés (structures acier et mixte)- Reconstitution de l'effondrement des Twin Towers

Niveau requis
connaissance des Eurocodes pour le dimensionnement des structures béton, acier, mixte et bois - notions de transfert thermique

Modalités d'évaluation
7 séances de 2 heures

Période : Automne
Nombre d'heures : 14
Crédits ECTS : 2
École : École des Ponts ParisTech
Dernière mise à jour : mercredi 03 août 2011

Cristallographie, diffraction et symétries

Ce cours porte sur les symétries et leur usage en chimie. Il traite donc de la cristallographie (empilement périodique) et de rudiments de la théorie des groupes.

Il vise a donner aux étudiants les bases nécessaires :
- à l'interprétation d'expériences de spectroscopie (infra-rouge, raman, UV -visible)
- la chimie théorique (liaison chimique, mécanique quantique)
- la chimie du solide

1) Cristallographie géométrique

La symétrie des cristaux s'appuie sur un empilement périodique (réseaux) et des opérations de symétries d'orientation. La combinaison des deux types de symétrie (translation- orientation) permet de définir des symétries de positions et des groupes d'espace

- la métrique du cristal : plans et distances réticulaires
- Le réseau direct la maille, le réseau réciproque et les normales
- Propriétés angulaires, loi de constance des angles
- Symétries, loi de Curie, groupes ponctuels et systèmes cristallins
- Symétrie et périodicité, modes de réseau, réseaux de Bravais, groupes d'espace

2) Radiocristallographie

L'application discutée est la diffraction des rayons X et la résolution de structures cristallines. Le cours s'appuie ici sur les travaux pratiques de cristallographie.

- Production des rayons X et interaction des RX avec la matière
- Diffusion par un milieu continu - équivalence à une transformation de Fourier, espace dual
- Diffraction des RX par les cristaux, facteur de diffusion atomique, facteur de structure
- Loi de Bragg, construction d'Ewald
- Diffraction par les poudres cristallines, méthode de Debye- Scherrer
- Détermination des structures, problème des phases

3) Théorie des groupes

Un retour sur les symétries ponctuelles discute la fabrication et l'usage pratique de la table de caractères et son application à
- la structure électronique d'une molécule
- les spectroscopies de vibration infrarouge et raman.
- le champ cristallin et la spectroscopie optique

Niveau requis
connaissances mathématiques et physiques de niveau licence (produits scalaire et vectoriel calcul tensoriel, rayonnements électromagnétiques)

Modalités d'évaluation
un examen terminal en commun avec chimie du solide

Période : Printemps
Nombre d'heures : 31
École : Chimie ParisTech
Dernière mise à jour : vendredi 14 janvier 2011

Conception de procédés

Objectifs: Notre santé, notre niveau de vie, notre confort, et ceux des générations futures, dépendent étroitement de la mise sur le marché de médicaments, d'aliments, de produits cosmétiques, de parfums, de lessives, de matières plastiques, de peinture, de pneumatiques, de carburants, de métaux, d'électronique, de piles, de ciment, de papier, de verre, etc., sans oublier l'eau potable.L'enseignement est conçu autour de plusieurs procédés de transformation de la matière, et propose une sensibilisation à la relation entre leur conception et leurs performances ou les propriétés de leur production. Aussi aborde-t-il successivement plusieurs situations industrielles, en en expliquant les processus mis en oeuvre : phénomènes de transport, échanges, écoulement, réactions, et laisse-t-il une part importante à la réalisation de mini-projets en petits groupes.Après la description macroscopique du transport de matière par "convection forcée" (de con vehere : transporter ensemble), commune à tous les procédés de transformation, ce cours montre comment sont couplés les transferts convectif ou diffusionnel (de dis fundere : se répandre) de la matière et de la chaleur, et souligne l'analogie et la similitude des corrélations entre critères adimensionnels pour les deux types d'extensité. Le séchage dans les industries agroalimentaires ou pharmaceutiques est l'application retenue pour ce type de couplage, et donne lieu à une séance de travaux pratiques. Au travers de procédés pour l'environnement : capture de gaz acides (CO_2) par absorption ; pétrochimique : réacteurs catalytiques, ou biotechnologiques : aération des fermenteurs, l'élève apprend à décrire simplement les interactions entre transfert de matière et réactions dans des contacteurs polyphasés.Avec les procédés de précipitation est abordé le problème du contrôle de propriétés d'usage, comme la taille de particules pigmentaires.Une dernière catégorie d'opérations capable d'offrir une très grande variété de produits est enfin présentée, celle des polymérisations.La visite d'un site industriel permet d'observer les équipements présentés en cours, et leur organisation dans une chaîne de production.Les connaissances acquises sont mises à profit dans la réalisation de petites études technico-économiques en binômes sur plusieurs séances, qui font l'objet d'un rapport et d'un exposé. A l'issue de ce cours, les élèves auront acquis une première expérience sur la conception et le dimensionnement de procédés en présence ou non d'échanges de matière et de chaleur, et de réactions chimiques, à partir de données thermodynamiques et cinétiques, dans l'objectif de réussir une propriété : degré d'humidité, teneur en gaz polluant, quantité d'antibiotiques, taille de pigments, grade d'un polymère, etc.

Programme: Transport convectif : caractérisation par la distribution des temps de séjour.Analogie et couplage des transports de matière et de chaleur.Séchage.Absorption de gaz polluants et réacteurs catalytiques.Précipitation de poudres pigmentaires.Polymérisation.T.P. de séchage d'un produit alimentaire.Visite d'un site de productionTraitement de cas en mini-projets.

Période : Automne
Nombre d'heures : 37
Crédits ECTS : 3
École : MINES ParisTech
Dernière mise à jour : samedi 11 décembre 2010

Energies : réalité et perspectives

1 - Introduction - Enjeux par Bernard BOULLIS
Introduction aux enseignements et conférences
Énergie : définitions, unités, mesures, énergie finale, énergie primaire, vecteurs énergétiques

2 - Besoins en énergie par Bertrand BARRE
Mise en perspective historique ; démographie ; Panorama actuel, répartition par secteurs, par régions ; Futur : scénarios et incertitudes ; Les grands enjeux …

3 – Challenges technologiques des nouvelles énergies par Gilles COCHEVELOU

4 - Énergies et climat par François-Marie BREON
Effet de serre, mécanismes, conséquences, scénarios ; séquestration, conversion CO2…

5 – Économie de l'énergie par Jacques PERCEBOIS
Prix du kWh ; Politique et marché européens ; Contexte français ; Sécurité d'approvisionnement

6 - Énergies fossiles par Roland GEOFFROIS
Concept de "peak oil", plafonnement des réserves pétrolières et gazières ; quel avenir pour le pétrole, quelles énergies pour demain ?

Période : Automne
Nombre d'heures : 20
Crédits ECTS : 1
École : Chimie ParisTech
Dernière mise à jour : vendredi 25 novembre 2011

Option Génie chimique

A l'issue de cette formation les étudiants seront capables de:
– Réaliser la simulation simplifié d'un procédé industriel réel.(8000h/an, 100 000 T/an,…): choix du réacteur, optimisation des paramètres opératoires, choix des opérations de séparation.
– Évaluer les performances de l'unité (production, sélectivité,..).
– Évaluer le potentiel économique du procédé.
– Observer l'influence de paramètres opératoires et de paramètres d'optimisation.
– Présenter les résultats

• Exemples de sujets de projets :

– Modélisation et simulation de la polymérisation de l'oxyde de propylène – Analyse de risques
– Conception de réacteurs tubulaires catalytiques non isothermes – Aspects technologiques et économiques

Débouchés: Ingénieur Procédés : vidéos à voir sur :

http://www.canal-u.education.fr/

Qu'est ce que l'ingénierie industrielle (57 min)

(une palette de tous les savoirs, ingénieurs-constructeurs pour les "majors", du traditionnel aux techniques de pointe)

Julien Pouillot

La construction d'une usine : du virtuel au réel (1h 05 min)

Anne Pouliquen

Points fort de la formation :

- maitrise des logiciels de simulation de procédés professionnels
- Démarche projet

• Cours (2h):

Cours à la "demande" concernant les aspects de simulation et en particulier l' évaluation économique.

• Projets (14h): Simulation statique d'une unité industrielle.

Modéliser, optimiser, évaluer l'unité.

Logiciels industriels: HYSYS, ASPEN PLUS, COMSOL Multiphysics, ICARUS, SCILAB

Encadrants: S.Cavadias, C.Guyon, W. Morscheidt, F.Rousseau,

Modalités d'évaluation
– Rapport de projet

– Evaluation en cours de projet

– Présentation orale

Période : Printemps
Nombre d'heures : 28
Crédits ECTS : 2
École : Chimie ParisTech
Dernière mise à jour : vendredi 14 janvier 2011

Thermostatistique

L'interprétation des phénomènes macroscopiques à l'aide de mécanismes microscopiques est une des aventures intellectuelles les plus fascinantes qui soit. Pour cela, la thermodynamique statistique, par la voie traditionnelle analytique, ou plus récemment par la voie numérique (les simulations moléculaires) est un outil d'une grande utilité dans beaucoup de problématiques scientifiques et technologiques contemporaines. Ce cours est destiné à présenter de façon succincte les concepts de base de cette science.

Introduction

Les Ensembles Statistiques :
- La notion d'ensemble statistique
- L'ensemble canonique
- Température et entropie en thermodynamique statistique
- Autres ensembles statistiques
- Fluctuations et condition d'équivalence entre les ensembles

Application aux systèmes « dilués » :
- Statistiques de Boltzmann, Fermi-Dirac et Bose-Einstein
- Gaz parfait

L'approximation classique :
- Formalisme de Lagrange-Hamilton et fonction de partition classique
- Théorème d'équipartition de l'énergie et mouvement Brownien
- Théorie des fluides moléculaires : le modèle de van der Waals

Retour aux ensembles statistiques : introduction aux méthodes de simulation moléculaire

Niveau requis
Notions de thermodynamique macroscopique

Modalités d'évaluation
Examen écrit avec documents et calculette

Période : Printemps
Nombre d'heures : 14
École : Chimie ParisTech
Dernière mise à jour : mardi 19 octobre 2010

Gastronomie Moléculaire

Pour le public cuisiniers/chercheurs/ industriels/grand public,
on montrera l'intérêt de connaissances de physico-chimie (sans calcul) pour la description des transformations culinaires.

On cherchera aussi, généralement, à :

donner les bases techniques de l'innovation et de la créativité culinaires ;
promouvoir le raisonnement moléculaire dans l'industrie alimentaire ;
montrer l'intérêt de connaissances fondamentales pour fertiliser la technologie ;
contribuer à la formation permanente des personnels technologiques et techniques des industries alimentaires ;
contribuer à la formation initiale de techniciens se destinant à l'industrie alimentaire ;

Plus spécifiquement, on enseignera aux auditeurs à :

être capable d'identifier les données et les variables dans le cadre d'une analyse simple
définir leurs objectifs (quelles informations sont recherchées) et à chercher par quelles méthodes ces objectifs peuvent être atteints (méthodologie à utiliser)
connaître les mesures statistiques de bases et savoir les interpréter (moyenne, écart-type, médiane, loi normale)
analyser les types de données relatives et absolues
connaître le sens d'un échantillonnage représentatif et les règles d'échantillonnage associées
connaître les principaux types de procédés unitaires et l'enchaînement de ceux-ci ;
connaître les basiques des procédés types, par exemple pour la cuisson : les équipements et méthodes, les paramètres clefs et leurs limites…
appliquer des protocoles établis en les comprenant
être capable de lire un schéma de procédé
appliquer des protocoles de conservation, d'assemblage, de transformation et de conditionnement des produits manipulés ;
connaître les paramètres qu'il est important de maîtriser (paramètres critiques
mener les mesures nécessaires au contrôle des paramètres clés
connaître et appliquer les protocoles de mise en œuvre des ingrédients fonctionnels (texturants, arômes)
maîtriser les principaux système simples et connaît les systèmes élaborés (émulsion….)
Pour le public étudiants,
on montrera que la connaissance précise passe par une démarche quantitative.

Parmi les objectifs généraux, on cherchera à :

utiliser la gastronomie moléculaire pour l'enseignement de la chimie, de la physique et de la physico-chimie ;
promouvoir le raisonnement moléculaire dans l'industrie alimentaire ;
montrer l'intérêt de connaissances fondamentales pour fertiliser la technologie ;
contribuer à la formation permanente des personnels technologiques et techniques des industries alimentaires ;
Plus spécifiquement, les auditeurs apprendront à :

connaître les mesures statistiques et à les interpréter

comprendre les principes physico-chimiques des procédés ainsi que les interactions principales avec les ingrédients ;
vulgariser, transmettre et former sur la base de ces connaissances.
choisir le type d'équipement le mieux adapté en fonction des problématiques
suivre les nouvelles solutions techniques
décrire une problématique touchant un procédé de façon détaillée et circonstanciée.
formuler de manière étayée une demande d'étude approfondie
connaître les impacts sur la couleur/aspect de surface, la texture et le goût :
des principales opérations unitaires industrielles,
des conditions d'environnement du produit,
des interactions entre les constituants d'un produit élaboré,
du réchauffage aux micro-ondes
connaître les processus de construction des systèmes élaborés, et de texturation
connaître et maîtriser les paramètres qui influencent ces phénomènes,
diagnostiquer une anomalie et de proposer des actions correctives/préventives pour la corriger

2009 : « Les précisions culinaires »
2010 : " Télé-enseignement et cuisson des légumes"

(par « précisions culinaires », on entend dictons, tours de main, trucs, astuces, modes d'emploi, adages, maximes…). Ces cours sont gratuits (mais sur inscription obligatoire) et destinés aux cuisiniers, industriels ainsi qu'au grand public.

Hervé THIS propose des cours ouverts au grand public, aux cuisiniers et aux étudiants d'autres écoles.

Chaque année, le socle de base de chaque niveau sera « teinté », afin de renouveler l'enseignement et d'intégrer de façon explicite les acquis des recherches effectuées. Après « Les sauces et les plats qui en sont dérivés » (2004-2005), « Les cuissons » (2005-2006) et « Jeux de consistances et de texture » (2006-2007), le thème proposé pour 2007-2008 fut « Pourquoi la science est une composante indispensable des transferts technologiques ».

Période : Hiver & Printemps
Nombre d'heures : 15
École : AgroParisTech
Dernière mise à jour : mardi 25 janvier 2011

Les fondations de la chimie moléculaire

Ce cours s'adresse aux étudiants visant une carrière dans des domaines industriels ou scientifiques où ils auront, un jour, à résoudre des problèmes faisant appel à la chimie : métiers de la santé, industrie lourde, pétrolière, énergie, environnement etc. La philosophie en sera voisine de celle du cours précédent mais les concepts et leurs applications seront beaucoup plus fouillés.

Le cours sera organisé en liant étroitement la chimie quantique et la chimie organique. Le but est de donner aux élèves les instructions théoriques permettant de rationaliser les grandes classes de réactions chimiques et de donner quelques applications de ces principes en synthèse organique. Compte tenu de l'importance croissante des métaux de transition et des éléments lourds principaux dans la chimie industrielle, les bases spécifiques à ces éléments seront aussi enseignées.

Références bibliographiques :
Introduction à la chimie quantique par Philippe Hiberty (2004).
Table des matières
Chimie moléculaire des éléments de transition par François Mathey et Alain Sevin (2000).
Fiche détaillée
Table des matières
Ouvrages disponibles auprès des Editions de l'Ecole Polytechnique.

Niveau requis
Les élèves issus d'une autre filière que la filière PC doivent avoir obligatoirement suivi le cours de CHI411 qui est un pré-requis obligatoire pour pouvoir suivre le cours de CHI431.

Période : Automne
Nombre d'heures : 72
Crédits ECTS : 10
École : École Polytechnique
Dernière mise à jour : mardi 25 octobre 2011

Chimie inorganique avancée

Plus de 80% des procédés de fabrication comprennent au moins une réaction catalysée. La catalyse permet généralement de diminuer les coûts (énergie, séparation, retraitement, …) et de limiter l'emploi de matières toxiques ou dangereuses. L'enjeu économique et écologique est donc évident.Pour bien comprendre les phénomènes mis en jeu, le cours présente les différents types de catalyse à travers l'étude de grands procédés industriels et de cycles fondamentaux du vivant. Les problèmes liés à la performance et à l'optimisation d'un système catalytique, à son coût, à son impact écologique, sont mis en avant et expliqués par une approche cinétique mécanistique. Le cours s'appuie sur les connaissances acquises en deuxième année en Chimie et Matériaux Inorganiques.

Contenu
Catalyses industrielles
Catalyse: concepts fondamentaux
Principe de la catalyse

Catalyse homogène vs hétérogène
Estimer qu'un catalyseur est bon: activité, sélectivité, stabilité, quotient environnemental, efficacité atomique
Connaissances et développements de la catalyse
Catalyses et grands procédés industriels
Catalyse homogène: procédés, mécanismes et aspects cinétiques, problèmes et solutions
Catalyse hétérogène: procédés, préparation des catalyseurs, mécanismes
Mécanismes et cinétique de catalyse hétérogène
Etapes réactionnelles: physisorption vs chimisorption
Adsorption: modèles de Langmuir, BET, mesures des aires spécifiques
Equations de vitesses: systèmes solide-gaz et solide-liquide, mécanismes de Langmuir-Hinshelwood, Eley-Rideal
Performances d'un système catalytique hétérogène
Propriétés d'un bon catalyseur
Stabilité: désactivation du catalyseur
Sélectivité
Types de réacteurs
Biocatalyses
Eléments de la biosphère
Rôle biologique des ions métalliques
Calcium dans les systèmes biologiques
Transport et stockage de l'oxygène
Catalyse acide, enzyme à zinc
Métalloenzymes, généralités
Anhydrase carbonique
Carboxypeptidases
Catalyse redox
Généralités et importance dans les processus de respiration et de photosynthèse
Protéines Fer-Soufre
Cytochromes de la chaîne de transport des électrons
Les protéines à cuivre bleu
Cytochrome P-450
Coenzyme B12, une biomolécule organométallique
Fixation de l'azote
Photosynthèse
Procédés industriels utilisant des biocatalyseurs
Cinétique des réactions catalysées par les enzymes
Acrylamide à partir d'acrylonitrile
Aspartame par synthèse peptidique enzymatique
L-aminoacides par procédé à l'amylocylase

Période : Hiver & Printemps
Nombre d'heures : 12
Crédits ECTS : 3
École : École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la Ville de Paris
Dernière mise à jour : vendredi 19 avril 2013

Modélisation moléculaire

Comparaison des méthodes de modélisation quantiques et classiques
Géomètrie moléculaire et énergie
Champs de force en spectroscopie et mécanique moléculaire
Calcul des charges
Paramètrage des fonctions énergétiques
Chaleur de formation, énergie stérique, énergie de tension
Méthodes numériques en mécanique moléculaire
Dynamique moléculaire
Exemples illustrant les applications potentielles de la mécanique moléculaire

Période : Printemps
Nombre d'heures : 14
École : Chimie ParisTech
Dernière mise à jour : vendredi 14 janvier 2011

Sciences Analytiques et Bioanalytiques

Il n'existe pratiquement aucun domaine socio socio-économique ou scientifique qui puisse s'affranchir des apports de l'analyse chimique (sécurité alimentaire, environnement, fraudes et contrefaçons, dopage, patrimoine historique et archéologique…). Les caractéristiques des demandes sont : rapidité, faible coût, fiabilité, possibilité de réaliser les analyses à partir de microéchantillons (une goutte de sang..), utilisation sur le terrain, détermination d'un très grand nombre de composés dans un même échantillon (produits pétroliers, protéomique), recherche de composés à l'état de traces et d'ultratraces, spéciation des éléments, etc. Pour répondre à ces demandes, la chimie analytique a beaucoup évolué ces dernières années, grâce en partie à de nombreuses avancées technologiques notamment dans le domaine des sciences séparatives et de leur couplage avec la spectrométrie de masse, mais aussi grâce au développement croissant de la chimie bioanalytique avec l'utilisation d'outils biologiques (anticorps, récepteurs, enzymes, brins d'ADN, etc.) dans divers immunoessais, bioessais et biocapteurs. On assiste également à une miniaturisation des techniques d'analyse, ce qui permet des analyses plus rapides et consommant moins de réactifs et solvants pour le diagnostic rapide. Les laboratoires-sur-puces (LOC pour lab-on-chip) sont en plein développement et font appel à la microfluidique.Ce cours est destiné à fournir aux étudiants les connaissances de base nécessaires à la résolution d'un problème analytique, quelle que soit l'origine de la demande. Il vise également à fournir les concepts nécessaires au développement de nouvelles méthodologies, le plus souvent miniaturisées, secteur en plein essor actuellement dans le domaine du diagnostic médical et environnemental,Il débute avec l'étude des divers types d'interactions et de modes de transport aux interfaces. En effet, quelles que soient

l'information recherchée sur une substance chimique (concentration, structure, état chimique, prévision de son transport ou de son élimination, etc.) et la nature du milieu dans lequel elle se trouve (chimique, biochimique, biologique), la conception d'une stratégie analytique requiert toujours une bonne connaissance des interactions qui lient cette substance à son propre milieu et dans la plupart des cas la mise en oeuvre d'une méthode de séparation. Ensuite, les aspects fondamentaux des méthodes séparatives et de l'électrochimie analytique sont présentés de façon sommaire car ils sont approfondis lors des séances de préceptorat et de TD alors que leurs aspects pratiques sont abordés via les TP. Ceci permet de donner plus d'importance à la mise en œuvre de séparations multidimensionnelles pour l'analyse des mélanges complexes et notamment pour l'analyse protéomique, à la chimie bioanalytique (immunoessais, bioessais, biocapteurs) et à la miniaturisation sous forme de laboratoires sur puces.

Contenu
Définition des caractéristiques de la chimie analytique actuelle
Sciences séparatives
Introduction aux méthodes chromatographiques : grandeurs fondamentales et les diverses interactions mises en œuvre
Chromatographie en phase gazeuse
Chromatographie en phase liquide (les différents modes : adsorption, partage, échange d'ions…)
Modes de détection et couplage avec la spectrométrie de masse
Les méthodes électrocinétiques (capillaire libre, phase micellaire, électro-chromatographie
Analyse de traces : traitement des échantillons
Couplage bidimensionnels pour la séparation de mélanges complexes (chromatographie, électrophorèse) - applications à l'analyse de produits pétroliers et à l'analyse protéomique
Electrochimie
Aspects fondamentaux
Electrochimie analytique
Méthodes bioanalytiques
Basées sur la reconnaissance structurale : immunoessais
Basées sur le mode d'action : bioessais par inhibition enzymatique et bioessais cellulaires
Miniaturisation : microsystèmes séparatifs intégrés et laboratoire-sur-puce pour l'analyse totale
Biocapteurs
Préceptorat
Chromatographie en phase surpecritique, avantages-inconvénients/intérêts par rapport aux CPG et CPL.
CPL : espèces moléculaires / adsorption & partage normal & partage inverse
CPL : espèces ioniques ou ionisables / paire d'ions & échange d'ions
Electrochimie analytique
Le traitement de l'échantillon
Méthodes Electrophorétiques / Microsystèmes
Travaux pratiques
Le stage de travaux pratiques de quatre semaines permet d'approfondir par l'expérience les différentes méthodes que sont les chromatographies en

phase gazeuse et en phase liquide, l'électrophorèse et l'électrochimie.
Il est abordé pour ces méthodes les grandeurs fondamentales et les différentes techniques (séparation, détection, couplages divers) permettant de les mettre en œuvre. Le traitement de l'échantillon associé à la chromatographie en phase liquide et à celle en phase gazeuse est également mis en œuvre sur les exemples que sont l'analyse de traces de pesticides dans les eaux de surface et de la caractérisation des composés volatils dans le vin.
Les élèves au cours de ces travaux pratiques réalisent quinze manipulations différentes. De façon générale chaque manipulation traite, outre l'aspect plus théorique de la méthode, un cas concret de la caractérisation/analyse de composés issus de domaines aussi variés que sont l'environnement, l'agro-alimentaire, l'industrie pharmaceutique et celle pétrolière.
Il est important de noter que les élèves manipulent du matériel si possible de dernière génération (exemple du couplage de la chromatographie en phase liquide avec la spectrométrie de masse) de façon par la suite à être rapidement opérationnel aussi bien dans le milieu industriel que celui de la recherche.

Niveau requis
Chimie analytique de base (Chimie des solutions, pH et complexes, oxydo-réduction)

Modalités d'évaluation
examen écrit sur le cours, compte-rendu de TP.

Période : Hiver & Printemps
Nombre d'heures : 96
Crédits ECTS : 7
École : École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la Ville de Paris
Dernière mise à jour : jeudi 02 mai 2013

Energie, réduction et mofication de la consommation

L'objectif du cours est de donner aux élèves des repères sur les principaux enjeux énergétiques du 21ème siècle : panorama des ressources disponibles, tant en ce qui concerne l'offre de production par filières, que les perspectives de réduction de la demande par secteurs, limitations technologiques et efforts de recherche, maîtrise de la demande notamment dans les domaines des transports et du bâtiment.
L'objectif visé dans ce module est que les élèves disposent des éléments leur permettant de mener leur propre analyse. Sans devenir un expert, les élèves seront en mesure d'exercer un regard critique sur les débats de société relatifs aux questions énergétiques.

Le cours abordera les thèmes suivants :
Problèmes énergétiques globaux
Le secteur électrique
Les transports

Efficacité énergétique et maîtrise de la demande en énergie (MDE)
Energies renouvelables
Contexte énergétique et politiques publiques

Modalités d'évaluation
Le module est composé de 8 séances de 2 heures en première partie de semestre. Le déroulement du cours sera consacré alternativement à la diffusion de connaissance proprement dite et à des séances de restitution de travaux préparés par les élèves en dehors des heures d'enseignement.
Enfin, une neuvième séance est consacré à l'évaluation écrite finale

Période : Automne
Crédits ECTS : 2
École : École des Ponts ParisTech
Dernière mise à jour : mercredi 03 août 2011

Synthèse des Polymères

Cet enseignement vient compléter pour les chimistes le cours "matériaux macromoléculaires" de 2ème année, dans lequel les propriétés physiques et mécaniques des polymères sont analysées en relation avec la structure chimique et l'architecture des chaînes. Le cours vise à préciser les stratégies de synthèse en fonction de la nature des monomères et des caractéristiques de chaîne souhaitées. Des illustrations concrètes sont proposées à partir d'articles récents de la littérature.

Contenu
Polymérisation par étapes
Principes généraux de la polycondensation et de la polyaddition.
Synthèse de macromolécules linéaires ; exemples de polycondensats industriels (polyesters, polyamides, polyuréthanes, polycarbonates, silicones, polyimides).
Synthèse de réseaux (gélification, vitrification, diagrammes TTT) ; exemples de systèmes industriels.
Méthodes conventionnelles de polymérisation en chaîne
Principes généraux (notion de site actif, étapes de la polymérisation,. aspects thermodynamiques , notion de température plafond).
Polymérisation radicalaire.
Amorceurs, équations cinétiques, réactions de terminaison, réactions de transfert et de ralentissement, techniques de polymérisation. Exemple de la polymérisation du polyéthylène basse densité.
Polymérisation anionique.
Amorceurs, notion de polymère « vivant », conséquences. Exemple de la polymérisation des diènes 1,3.
Polymérisation cationique.
Amorceurs, réaction de propagation, réactions de terminaison et de transfert. Exemple de la

polymérisation du poly(isobutène).
Polymérisation par complexes de coordination.
« Catalyseurs » Ziegler-Natta, systèmes métallocènes.
Exemple de la polymérisation du polyéthylène haute densité et du polypropylène isotactique.
Intérêt industriel des métallocènes.
Réactions de copolymérisation, de greffage et de réticulation
Copolycondensats.
Synthèse de copolymères alternés, statistiques, à blocs, en peigne.
Influence de la réactivité des monomères sur la structure des chaînes.
Méthodes de réticulation des chaînes. Exemple de la vulcanisation des caoutchoucs
Méthodes avancées de synthèse macromoléculaire
La polymérisation radicalaire "contrôlée".
Avantages et limites en regard de la polymérisation radicalaire conventionnelle.
Conditions pour un "contrôle" des polymérisations cationiques.
Synthèse de polymères en étoile.
La voie anionique. La voie radicalaire « contrôlée ».
Synthèse de macrocycles
Stratégies de synthèse d'architectures complexes.
Dendrimères et polymères hyper-ramifiés.
Hybrides organique - inorganique.
Synthèse "verte" de polymères
Synthèses d'origine naturelle. Exemple de l'acide lactique
Amorceurs d'origine naturelle. Catalyse enzymatique.
Réticulation des triglycéridesd'acides gras(huile de lin, huile de ricin).
Synthèse de biocomposites et de nano-biocomposites.

Période : Hiver & Printemps
Nombre d'heures : 14
Crédits ECTS : 2
École : École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la Ville de Paris
Dernière mise à jour : jeudi 02 mai 2013

Synthèse Approfondie et Chimie Verte

A l'heure actuelle, la sélectivité, et en particulier l'énantiosélectivité sont incontournables en synthèse organique. Obtenir de façon sûre et économique tel ou tel énantiomère d'une molécule donnée est l'objet d'efforts très importants, tant dans l'industrie que dans le monde académique.

Contenu
Enantiosélectivité, diastéréosélectivité : définitions et rappels

Enantiotopie, diastéréotopie. Configuration absolue et configuration relative.
Rappels sur les dédoublements: acides et bases du pool chiral, enzymes.
Synthèses diastéréosélectives. Additions nucléophiles sur le carbonyle muni d'un centre stéréogène. Modèles de Cram et de Felkin-Anh (réduction par LiAlH4 et addition nucléophile). Cas du Cram chelaté.
Réactions avec RMgX chélaté ou non. Cas de RMgX+MgX2.
Alkylation énantiosélective
Alkylation en série racémique
Copule d'Heathcock
Oxazolidinones d'Evans Copule de Nagao-Fujita
Copules d'Opolzer et de Meyers.
Copule d'Enders (SAMP et RAMP)
Aldolisation énantiosélective
Etat de transition de Zimmermann.
Aldolisation intermoléculaire (Aldéhydes et énolates sans centre stéréogène)
Réaction des énamines chirales (Michael). Imines (cat. Corey)
Addition conjuguées: Sakuraï (TiCl4), (utilisation de la proline)
Oxydation énantiosélective
Epoxydation: réactifs possibles, m-CPBA, H2O2, oxone, N-sulfonyloxaziridines.
Epoxydation de Katsuki-Sharpless avec modèle du mécanisme et résolution cinétique.
Réaction de Jacobsen (oléfines de type Z). (Comparaison des différentes méthodes d'époxydation)
VO(acac)2
Ouverture des époxydes par les nucléophiles. (BF3.Et2O, HBr, OH-, HBr, DIBAL-H, RedAl, cuprates)
Attaque des hydroxyépoxydes par des nucléophiles (Ti, REDAL, LiCu(CH3)2).
Réarrangement de Payne suivie d'attaque nucléophile.
Ouverture d'époxyde avec des bases chirales (Simpkins).
Dihydroxylation de Sharpless
Coupure des oléfines (O3, OsO4-NaIO4, OsO4/NMO et NaIO4, Pb(OAc)4)
Oxydation de cétones (m-CPBA, O2, SeO2 et CrO3).
Réaction des oléfines munies d'un centre stéréogène, Réactions de réduction
Modèle de Houk
Hydroboration des oléfines avec un centre stéréogène en.
Utilisation du 9-BBN
Réducteurs : AlpineBorane, Boronate (avec Rh), réducteur de Corey, BINAL.
Hydrogénations énantiosélectives : Noyori, Knowles, Kagan (DIOP) ; réduction des cétones.
Enaminoester donne dérivé d'acide aminé actif.
Réarrangements [4+2] et sigmatropiques [3+3]
Diels-Alder, réactions normales, intramoléculaires. Diels-Alder en série optiquement active(Ti(OR*)4). Diels-Alder sur alcynes.
Hétéro Diels-Alder. Réarrangement d'ylures, réarrangement chélotropique (SO2). Diène de Danishefsky [4+2] et [2+3], oxyde de nitriles, N-oxydes, Cycloadditions [2+2] thermiques et photochimiques. Réaction de Paterno-Buchi.
Cétène. [2+2] sur des énones
Cope, Claisen, oxy-Cope et ène-réaction.

Réarrangement des hydroxyesters silylés. Sigmatropiques [2,3]. Ene sulfoxyde/Zn, énylures de soufre, énaminiums (Simpkins).
Eliminations thermiques: chélotropiques (SO2), réarrangement de Wittig.
Décomposition des dérivés azo, des oxydes de séléniums et des oxydes d'amines
Organométalliques
Vinyllithien, synthèse (échange métal-métal) et réactivité.
Transmetallation avec vinylstannane (cis>>trans)
Attaque équatoriale RMgX sur des cétones.
Shapiro. Organométallique sur l'amide de Weinreb, attaque RMgX sur ester avec TMSCl.
Réformatsky.
Diéthylzinc activé. R2CuLi: attaque SN' sur un acétate d'allyle
Organocadmiens, Organocériens, Organocuivreux.
Complexes du palladium sur oléfines (Trost, Tsuji, Stille et Suzuki), réaction de Wacker.
Intermédiaires électrodéficients
LDA-TMSCl tBuBr sur les cétones, Friedel-Craft, Diazocétones.
Réactions en cascade (Johnson).
Réarrangements: Pinacoliques (acide et basique), Diazométhane sur C=O, Halogénocétones, Halogéno sulfones, réarrangement de Grobb.
Carbènes et nitrènes
Décomposition thermique ou photochimique des diazo. Préparation des aziridines.
Carbénoïdes.
Nitrènes: réarrangements de Hofmann, Schmidt et de Curtius.
PréceptoratEtude de grandes réactions énantiosélectives, de leurs applications et des facteurs qui les régissent :
Enantiosélectivité, alkylations énantiosélectives, aldolisations énantiosélectives
Oxydations énantiosélectives, réactions de réduction, réductions énantiosélectives sur alcènes avec centre stéréogène, réarrangements (première partie)
Réarrangements (fin), organométalliques, intermédiaires électrodéficients

Période : Hiver & Printemps
Nombre d'heures : 23
Crédits ECTS : 3
École : École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la Ville de Paris
Dernière mise à jour : jeudi 02 mai 2013

Chimie et Matériaux Inorganiques

Par l'étude d'applications faisant appel à des matériaux ayant des propriétés optiques, magnétiques, électroniques ou catalytiques spécifiques, les concepts fondamentaux de la chimie inorganique sont exposés. Les

aspects moléculaires et collectifs sont traités parallèlement. Les progrès réalisés en chimie de synthèse et dans la compréhension des propriétés permettent le développement de nouveaux matériaux et de nouvelles applications.

Contenu
Propriétés optiques
Champ cristallin et pierres précieuses
Luminescence et lasers
Propriétés électroniques
Transfert de charge et diode électroluminescente
Défauts cristallins et photographie argentique
Semiconducteurs et jonctions p-n
Propriétés magnétiques
Magnétisme moléculaire et bleu de Prusse
Lanthanides, actinides et IRM
Synthèse et réactivité
Chimie haute température et micro-électronique
Chimie douce et nanocristaux
Chimie de substitution vs chimie de transfert électronique
Isoméries et caractérisations
Préceptorat
Phénomènes de couleur dans les minéraux et les pierres précieuses
Lanthanides, actinides et Imagerie par Résonance Magnétique (IRM)
Chimie organométallique et catalyse homogène
Travaux pratiques
Quatre sujets sont proposés en relation directe avec le cours. Ils permettent d'approfondir les notions fondamentales tout en démontrant l'utilité de la chimie et des matériaux inorganiques dans des applications modernes et parfois quotidiennes :
Fabrication d'une diode électroluminescente avec [Ru(bpy)3]2+ (OLED) et synthèse d'un luminophore
Réalisation d'un cyanotype et d'une photographie argentique sans révélateur chimique
Fabrication d'une lame semiconductrice de SnO2 et d'une cellule électrochrome de gel de pentoxyde de vanadium
Utilisation d'un complexe de coordination dans le dosage de l'alcool (alcootest)

Période : Hiver & Printemps
Nombre d'heures : 76
Crédits ECTS : 5
École : École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la Ville de Paris
Dernière mise à jour : vendredi 20 janvier 2012

Identification de Composés Organiques

Dans ce cours sont présentés les concepts de base de la Résonnance Magnétique nucléaire et de la spectrométrie de Masse permettant de comprendre les applications de ces deux techniques pour la caractérisation chimique de composés organiques.

Contenu
Résonance magnétique nucléaire
Le format retenu pour cette partie du cours est de présenter les principaux concepts de base de la RMN du liquide et de les faire manipuler par les étudiants via l'interprétation de nombreux spectres 1H et 13C.Principe de la RMN.A- Spin nucléaire et moment magnétique associé.B- Effet Zeeman, phénomène de résonnance.Les principales interactions rencontrées en RMN du liquide et des solutions.A- Le déplacement chimique.- constante d'écran et déplacement chimique.- comment mesurer la constante d'écran.- contributions au déplacement chimique.B- Le couplage indirect spin-spin ou couplage J- introduction (niveaux d'énergie, multiplets, etc...).- découplages homo et hétéronucléaire.- équivalence : noyaux chimiquement et/ou magnétiquement équivalents.B- conditions de mesures vs allure des spectres RMN- fréquence du spectromètre.- température- pH- concentrations- mise en évidence des protons mobilesEchange chimique.- échange lent/échange rapide (équilibres tautomères, conformationnels, etc..).- échelle de temps de la RMNIntroduction à la RMN par impulsion et à la RMN par transformée de Fourier.- RMN du 13C.- séquence d'impulsion, découplage 1H- séquence DEPTPrincipe de la RMN 2D.- RMN du 13C.- séquence d'impulsion, découplage 1H- séquence DEPT
Spectrométrie de Masse
Principe général de la spectrométrie de masse.Ionisation par impact electronique.- Description d'un appareillage dit classique (analyseur à déviation magnétique)- enregistrement d'un spectre de masse- utilisation de la masse à basse résolution et à haute résolution- etude des fragmentationsPrincipe de l'ionisation chimiqueIntroduction au couplage GC-masseIllustration de l'utilisation des différentes techniques (IR, RMN 1H et 13C, Masse) pour la détermination de structure de deux composés organiques complexes
Travaux pratiques
A l'occasion des Travaux Pratiques de Chimie Organique, les étudiants mesurent et interprétent des spectres de RMN 1H, RMN 13C et des spectres de Masse sur des produits synthétisés en TP. Ils ont ainsi un retour expérimental sur leurs manipulations en TP de Chimie Organique.

Période : Automne
Nombre d'heures : 11
Crédits ECTS : 1
École : École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la Ville de Paris
Dernière mise à jour : mercredi 01 mai 2013