Catalogue des cours sélectionnés

1 : Bases théoriques de la chimie analytique
2 : Chimie et Matériaux Inorganiques
3 : Chimie inorganique avancée
4 : Chimie Organique
5 : De l'atome à la molécule
6 : Energie, réduction et mofication de la consommation
7 : Introduction à la chimie moléculaire
8 : Les fondations de la chimie moléculaire
9 : Liquides Colloïdaux
10 : Modélisation moléculaire
11 : Opérations unitaires du génie chimique
12 : Physique des incendies pour l'ingénieur
13 : Réactivité
14 : Synthèse Approfondie et Chimie Verte
15 : Thermodynamique Physico-Chimique

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 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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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