

III – Fiches d'organisation des unités d'enseignement (Etablir une fiche par UE)

IV - Programme détaillé par matière

(1 fiche détaillée par matière)

Programmes de Licence Chimie Inorganique

Semestre 5

Intitulé de la matière : Chimie structurale **Code Matière :** UEF5

Volume horaire global : 45 heures.

Volume horaire hebdomadaire : 4,5 heures (Cours : 3 h - TD : 1,5 h)

Crédits : 04. **Coefficient :** 03

Contenu du programme :

Chapitre 1

Rappel sur les structures métalliques (empilements et sites)

Chapitre 2

- Les structures ioniques (binaires: AB, AB₂, A₂B; ternaires: pérovskite ABO₃ et spinelle AB₂O₄).
- Energie réticulaire dans les structures ioniques

Chapitre 3

- Les structures covalentes et intermédiaires.

Chapitre 3

- Les structures moléculaires.

Chapitre 4

- Défauts ponctuels

Intitulé de la matière : Cristallographie Géométrique

Matière : UEF5

Volume horaire global : 45 heures.

Volume horaire hebdomadaire : 3 heures (Cours : 1,5 h - TD : 1,5 h)

Crédits : 04. **Coefficient :** 03

Contenu du programme

Chapitre 1

Le réseau direct : outils de description géométrique des cristaux

- Motif
- Réseau de translation-Nœuds
- Maille
- Réseau
- LES 7 Systèmes cristallins
- Plans réticulaires

Chapitre 2

Le réseau réciproque

- Définition et propriétés
- Zone de Brillouin
- Calcul de la distance inter réticulaire

Chapitre 3

La symétrie dans les cristaux

1. Symétrie d'orientation

- Opérateurs directs (Translation, Rotation)
- Opérateurs inverses (inversion rotatoire)
- Combinaisons des éléments de symétrie
- Classification en sept systèmes cristallins
- Les 14 réseaux de bravais
- Représentation des opérateurs de symétrie
- Représentation symbolique et graphique
- Représentation matricielle
- La projection stéréographique

2. La symétrie de position

Les axes hélicoïdaux

Les plans de glissements

Chapitre 4

Les 32 groupes ponctuels de symétrie d'orientation.

- Degré de symétrie
- Représentation

Chapitre 5

Les 230 groupes d'espace

- Projection de maille
-

Intitulé de la matière : Symétrie moléculaire et structures électroniques molécules

Matière : UEF

Volume horaire global : 67 heures.

Volume horaire hebdomadaire : 4,5 heures (Cours : 3 h - TD : 1,5 h)

Crédits : 06. Coefficient : 03

Contenu du programme

I- Symétrie moléculaire

- 1- Introduction
- 2- Opérations de symétrie d'une molécule
- 3- Groupes ponctuels de symétrie
- 4- Propriétés des groupes ponctuels
 - Combinaisons d'opérations de symétrie
 - Définition mathématique d'un groupe ponctuel
- 5- Rappels sur les matrices
 - Matrices inverses et déterminants et matrices de transformations
- 6- Représentation matricielle d'un groupe
- 7- Caractères de la représentation
- 8- Représentation matricielle et réduction de la représentation
 - Représentation matricielle
 - Réduction de la représentation et représentations irréductibles
- 9- Tables de caractères
- 10- Orthogonalité et réduction de représentation

II- Structures électroniques molécules

1. Orbitales moléculaires
 - Approximations l'équation de Schrödinger... (Rappels)
 - L'atome d'hydrogène et atome poly-électronique
 - Hamiltonien électronique et nucléaire (Born-Oppenheimer)
 - Méthode LCAO
 - Approximation orbitale et méthode des variations
 - exemple de l'atome d'hélium
 - Déterminants séculaires

- Déterminant de Slater
 - Applications : traitement exact de l'ion moléculaire H_2^+
2. Structure des molécules
- Orbitales de molécules de la chimie organique, méthode des fragments.
 - Principe général
 - Géométrie de fragments H_n et molécules AH_n ($n = 2,3,4$). Diagramme de Walsh.
 - Introduction aux complexes organométalliques
3. Théorie des bandes électroniques et chimie du solide
- La chaîne H_n : niveau de Fermi, distorsion de Peierls...
 - Fonctions de bloc et structure de bandes des solides

P.W. Atkins and R. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, 5th edition, Oxford University Press, 2005

A. Cotton, Chemical Applications of Group Theory, Wiley, NY 1990.

Paul H. Walton (traduit par F. X. Sauvage), Chimie et théorie des groupes, de boeck, Bruxelles 2001.

Intitulé de la matière : Spectroscopie moléculaire **Code Matière :** UEF5

Volume horaire global : 45 heures.

Volume horaire hebdomadaire : 3 heures (Cours : 1,5 h - TD : 1,5 h)

Crédits : 04. **Coefficient :** 03

Contenu du programme

Introduction

Caractérisation d'une radiation électromagnétique

Régions du spectre électromagnétique

Interaction lumière-matière

Représentation du spectre

Intensité et largeur des raies

Spectroscopie micro-ondes

Spectres de rotation des molécules diatomiques

Modèles du rotateur rigide et non-rigide

Substitution isotopique

Spectres de rotation des molécules polyatomiques

Spectroscopie infra-rouge

Spectres de vibration des molécules diatomiques

Modèles de l'oscillateur harmonique et anharmonique

Spectres de vibration-rotation des molécules diatomiques

Spectres de vibration des molécules polyatomiques

Influence de la rotation sur le spectre de vibration des molécules polyatomiques

Spectroscopie Raman

Effet Raman

Spectres Raman de rotation et vibration des molécules diatomiques

Spectres Raman de rotation et vibration des molécules polyatomiques

Détermination de la structure d'une molécule par spectroscopie Raman et infra-rouge

Spectroscopie électronique moléculaire

Spectres électroniques des molécules diatomiques

Approximation de Born Oppenheimer

Transitions électroniques vibrationnelles

Principe de Franck-Condon

Energie de dissociation

Structure rotationnelle des transitions électroniques vibrationnelles

Spectres électroniques des molécules polyatomiques

Analyse chimique par spectroscopie UV-visible

Spectroscopie de résonance de spin

Spin et le champ appliqué

Résonance magnétique nucléaire : RMN du proton

P.W. Atkins, Physical Chemistry, Freeman, N.Y 10th edition 2014

C.N Banwell, Fundamentals of Molecular Spectroscopy, McGraw-Hill, UK 2008

J.M. Hollas, Modern Spectroscopy, Wiley, England 2004

Intitulé de la matière : Programmation et chimie informatique

Matière : UET5

Volume horaire global : 22,5 heures.

Volume horaire hebdomadaire : 1,5 heures (TP : 1,5 h)

Crédits : 02. **Coefficient :** 02

Contenu du programme

- Brève description d'un ordinateur. Codage de l'information (Binaire, Hexa, ASCII). Interfaçage (RS232).

- Programmation FORTRAN et Linux.
 - Utilisation de logiciels de traitement de données de chimie (Molekel, Mercury, Molden, ChemDraw...etc)
 - Extraction des coordonnées atomiques (xyz, mol2....etc) à partir de fichiers CIF cristallographiques (.cif, .res, .txt)
-

Intitulé de la matière : TP Chimie minérale **Matière :** UET5

Volume horaire global : 22,5 heures.

Volume horaire hebdomadaire : 1,5 heures (TP : 1,5 h)

Crédits : 02. **Coefficient :** 02

Contenu du programme

TP 0 : Rappels théoriques.

TP 1 : Réactions de caractérisation des cations 1^{er} groupe ; Ag⁺, Pb²⁺, Hg₂²⁺, Tl⁺.

TP 2 : Recherche des cations du 1^{er} groupe dans une liqueur .

TP 3 : Réactions de caractérisation des cations 4^{ème} groupe ; Fe²⁺, Fe³⁺, Al³⁺, Cr³⁺.

TP 4 : Recherche des cations du 4^{ème} groupe dans une liqueur .

TP 5 : Réactions de caractérisation des cations 5^{ème} groupe ; Co²⁺, Ni²⁺, Mn²⁺, Zn²⁺.

TP 6 : Recherche des cations du 5^{ème} groupe dans une liqueur .

TP 7 : Recherche des anions simples ; Cl⁻, NO₃⁻, CO₃²⁻, SO₄²⁻.

Intitulé de la matière : TP Chimie structurale **Matière :** UET5

Volume horaire global : 22,5 heures.

Volume horaire hebdomadaire : 1,5 heures (TP : 1,5 h)

Crédits : 02. **Coefficient :** 02

Contenu du programme

Intitulé de la matière : Histoire des matériaux entre théorie et application

Code Matière : UED31

Volume horaire global : 22,5 heures.

Volume horaire hebdomadaire : 1,5 heures (Cours : 1,5 h)

Crédits : 01. **Coefficient :** 01

Contenu du programme

Intitulé de la matière : Ethique et déontologie

Matière : UET5

Volume horaire global : 22,5 heures.

Volume horaire hebdomadaire : 1,5 heures (Cours : 1,5 h)

Crédits : 01. Coefficient : 01

Contenu du programme

Courses focus on listening, reading, speaking and writing skills:

- Listening to scientific texts to become familiar with academic and technical words.
- Taking effective notes.
- Reading scientific texts quickly and effectively.
- Expressing ideas clearly and accurately in academic writing.
- Learning specific vocabulary connected with the subject of interest: inorganic and theoretical chemistry.

Semestre 6

Intitulé de la matière : Organométallique et Chimie de coordination

Code Matière : UEF6

Volume horaire global : 67 heures.

Volume horaire hebdomadaire : 4,5 heures (Cours : 3 h - TD : 1,5 h)

Crédits : 06. **Coefficient :** 03

Contenu du programme

I- Introduction

- 1- La Chimie de Coordination
- 2- Frontières de la chimie organométallique
- 3- Historique de la chimie organométallique
- 4- Tendances actuelles

II- Classification des composés organométalliques

- 1- Les éléments de transitions
- 2- Les postulats d'Alfred Werner
- 3- Complexes labiles et complexes inertes
- 5- Nomenclature des ligands et des complexes
- 6- Les ligands et notions d'orbitales frontières
- 7- Ligands monodentates et polydentates

III- Les complexes monométalliques

Les caractéristiques du métal de transition

- 1- le Nombre d'Electrons de Valence (NEV)
- 2- le Nombre d'Electrons non liants (NENL)
- 3- le Nombre d'oxydation (DO)
- 4- la Coordinence (C)
- 5- Hapticité des ligands et écriture linéaire des complexes
- 6- Règle des 18 électrons : Tendances et exception

Les complexes bimétalliques

- 1- Liaison M-M dans les composés bimétallique
- 2- Description générale des liaisons M-M et notions d'orbitales métalliques
- 3- Les liaisons simples
- 4- Les liaisons doubles
- 5- Les liaisons triples
- 6- Les liaisons quadruples

7- règles de comptage électroniques des complexes poly-métalliques

Références

- 1- Inorganic Chemistry by Catherine E. Housecroft and Alan G. Sharpe, Pearson Education Limited, Second Edition 2005.
 - 2- Chimie organométallique par D. Astruc, EDP Science, 2000.
-

Intitulé de la matière : Matériaux inorganiques

Matière : UEF6

Volume horaire global : 45 heures.

Volume horaire hebdomadaire : 3 heures (Cours : 1,5 h - TD : 1,5 h)

Crédits : 05. **Coefficient :** 03

Contenu du programme

Introduction : Problématique de la science des matériaux, les différentes classes de matériaux, le cycle de vie d'un matériau, le recyclage et domaines d'application des matériaux.

Chapitre 1 : Les céramiques

A- Céramiques traditionnelles ou aluminosilicatées.

- Les matières premières et leur préparation
- L'aspect rhéologique des pâtes et des barbotines. La définition de la floculation ainsi que les différents paramètres influençant la floculation ;
- La mise en oeuvre des céramiques (pressage, coulage, extrusion,...) et étude thermodynamique de l'étape de séchage ;
- L'étape de cuisson avec l'apparition de la mullite et le phénomène de frittage
- Les domaines d'application des céramiques traditionnelles.

B- Céramiques techniques.

- Les différentes méthodes de synthèse : réactions solide-solide, solide-liquide, solide-vapeur, précipitations, réactions en phase vapeur, dépôt sous forme de films ;
- Les propriétés développées par les céramiques: anti-abrasion, mécaniques, électriques, supraconductrices,...

Chapitre 2 : Le ciment

- Les matières premières intervenant dans les ciments.
- La nomenclature utilisée par les cimentiers et la chimie intervenant dans la fabrication du ciment.

- La théorie des colloïdes intervenant dans le processus de prise d'un ciment; - présentation des autres ciments existants (ciments aux cendres volantes, ciments blancs, ciments à haut module de Young,...).

Chapitre 3 : Les verres

- Définition courante et scientifique du mot verre.
- La genèse de l'état vitreux et les différents modèles expliquant cet état.
- Les matières premières des verres (formateur de réseau, fondants, modificateurs,...).
- Les propriétés des verres ainsi que les façons de mesurer ces différentes propriétés (transparence, absorption, résistance mécanique, électrique,...).
- Les différents verres synthétisés pour différentes applications (du verre à vitre au verre au plomb, en passant par les écrans de cristaux liquides, les lentilles,...).
- Les différents types de fours à verre ainsi que les différentes mises en oeuvre (verre plat, verre creux, verre bombé,...) ; - le renforcement des verres (trempe, recuisson, feuilletage, gainage (fibres de verre)).

Chapitre 4 : Transformations de phases

Intitulé de la matière : Radiocristallographie

Matière : UEF6

Volume horaire global : 67 heures.

Volume horaire hebdomadaire : 4,5 heures (Cours : 3 h - TD : 1,5 h)

Crédits : 04. **Coefficient :** 03

Contenu du programme

1. Diffraction des RX
 - RX
 - Absorption
 - Transmission
 - Diffusion

2. Lois géométriques de la diffraction

- Relations de LAUË
 - Relation de BRAGG
 - Notion de sphère d'Ewald
 - 3. Intensités diffractées
 - Calcul du facteur de structure
 - 4. Application du facteur de structure dans la détermination des modes de réseau et des éléments de symétrie de position (P C I F).
 - Recherche des plans de glissement
 - Recherche des axes hélicoïdaux
 - Recherche des groupes d'espaces
 - 5. Les Méthodes de diffraction
 - Méthode de poudres
 - Méthode de Debye-Scherrer
 - Diffractomètre de poudres
 - Méthode Guinier-De Wolff
 - Méthode des monocristaux
 - Méthode du cristal tournant
 - Méthode de Weissenberger
 - Méthode de Laüe
 - Méthode de Précession
-

Intitulé de la matière : Méthodes de la chimie quantique et réactivité

Matière : UEF6

Volume horaire global : 45 heures.

Volume horaire hebdomadaire : 3 heures (Cours : 1,5 h - TD : 1,5 h)

Crédits : 04. **Coefficient :** 03

Contenu du programme

Huckel et EHT

Méthode de Hückel (simple)

- Liaisons π et conjugaison
- Méthode et Approximations de Hückel simple pour le calcul des orbitales π
- Principe et notations. Exemple : éthylène, butadiène, allyle (Rappels)
- Application au calcul de propriétés moléculaires. Grandeurs accessibles

- Une utilisation simplifiée de la symétrie. Exemple du butadiène et du benzène.
- Molécules cycliques conjuguées
- Aromaticité : règle de Hückel. Notions d'anti- et non-aromaticité.
- Construction géométrique du diagramme orbitalaire (méthode de Frost et al.)

Méthode de Hückel étendue ou EHT (Extended Huckel Theory, R. Hoffmann 1963)

- Approximation de la méthode EHT
- Equation et matrice séculaire dérivée HC=SCE de la méthode EHT
- Evaluation des éléments matriciels H_{st} et S_{st} .
- Analyse de Population de Mulliken, charge et population nettes
- Indices de liaisons et population orbitalaire.
- Exemples d'application le méthane CH_4 .

Notions de réactivité ?

P.W. Atkins and R. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, 5th edition, Oxford University Press, 2005

Intitulé de la matière : TP Modélisation moléculaire

Code Matière : UET321

Volume horaire global : 22,5 heures.

Volume horaire hebdomadaire : 3 heures (TP : 1,5 h)

Crédits : 02. **Coefficient :** 02

Contenu du programme

CACAO

- Introduction aux techniques quantiques modernes de modélisation moléculaire
- Utilisation du logiciel de calcul Huckel simple
- Pratique de la méthode EHT, logiciel CACAO (Computed Aided Calculations of Atomic Orbital).
- Fichier données et output (file.in, file.out) et visualisation graphique.

Intitulé de la matière : TP Méthodes radiocristallographiques

Code Matière : UET

Volume horaire global : 22,5 heures.

Volume horaire hebdomadaire : 3 heures (TP : 1,5 h)

Crédits : 02. Coefficient : 02

Contenu du programme

Intitulé de la matière : TP Chimie minérale 2

Code Matière : UET

Volume horaire global : 22,5 heures.

Volume horaire hebdomadaire : 3 heures (TP : 1,5 h)

Crédits : 02. Coefficient : 02

Contenu du programme

TP 1 : Dosage du Calcium à l'échelle macroanalyse.

1^{ère} séance : préparation de la solution à l'analyse.

2^{ème} séance : dosage du Calcium dans la solution.

TP 2 : Dosage du Calcium à l'échelle microanalyse.

TP 3 : Dosage de la chaux dans différentes sources d'eaux.

TP 4 : Dosage de l'IODE dans le sel de table.

TP 5 : Dosage des sulfates dans une solution inconnue.

TP 6 : Manipulation du verre.

TP 7 : Présentation des exposés sur les quatre thèmes du TP.

Intitulé de la matière : Propriétés physiques des matériaux et applications

Code

Matière : UED

Volume horaire global : 22,5 heures.

Volume horaire hebdomadaire : 3 heures (Cours : 1,5 h)

Crédits : 01. Coefficient : 02

Contenu du programme

Intitulé de la matière : Anglais

Matière : UET

Volume horaire global : 22,5 heures.

Volume horaire hebdomadaire : 3 heures (Cours : 1,5 h)

Crédits : 02. Coefficient : 01

Contenu du programme

- Understanding technical documents and writing summaries in chemistry fields.
- Giving oral presentations