

**Programme détaillé par matière des
Semestres 5 et 6**

Semestre : 5

Unité d'enseignement : UEF 1

Matière : Thermodynamique des solutions

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Rappels des principes de base de la thermodynamique chimique.

- Principes de la thermodynamique.
- Thermochimie.
- Equilibres chimiques.
- Le corps pur.

Chapitre 2 : Thermodynamique des solutions.

- Solutions idéales et réelles.
- Grandeurs molaires partielles.
- Fonctions thermodynamiques de mélange et d'excès.
- Détermination expérimentale des coefficients d'activité.

Chapitre 3 : Diagramme d'équilibre.

- La loi des phases.
- Les systèmes binaires, ternaires et quaternaires.
- Méthode d'établissement des diagrammes.
- Diagrammes d'équilibres.

Unité d'enseignement : UEF1

Matière : Cinétique et catalyse

Contenu de la matière :

Partie I

1-Réactions simples (rappels)

- . Généralités et définitions
- . Réaction élémentaire
- . Loi simple des vitesses de réaction
- . Mesures expérimentales des vitesses de réactions.
- . Recherche de l'ordre
- . Influence de la température.

2-Réactions composées et Réactions complexes (rappels)

- . Réactions opposées ou équilibrées
- . Réactions parallèles jumelles et concurrentes
- . Réactions successives.

3- Théorie de l'acte élémentaire

- . Principe de l'étape déterminante
- . Approximation des états quasi-stationnaires
- . Théorie du complexe activé
- . Théorie de collision

4- Réactions complexes

- . Réactions par stade
- . Réactions en chaîne

Partie II Catalyse

1- Catalyse homogène

- . Définition
- . Réactions auto catalytique
- . Catalyse acido – basique
- . Mécanisme général de la catalyse

2- Catalyse enzymatique

- . Définition
- . Equilibre et états stationnaire
- . Détermination de la constante de Méchaelis

. Influence du pH et de la température

3- Catalyse hétérogène

. Définition

. Adsorption physique et Adsorption chimique

. Isothermes d'adsorption

Unité d'enseignement : UEF1

Matière : Symétrie moléculaire et théorie de groupes

Contenu de la matière :

I-Symétrie et groupes

1. Opérations et éléments de symétrie
2. Nomenclatures

II- Algèbre des symétries

1. Produit de deux opérations de symétrie
2. Opération inverse
3. Relation de conjugaison entre deux opérations de symétrie
4. Groupe ponctuel de symétrie
5. Classe de symétrie
6. Liste des groupes de symétrie moléculaire

7. Règles de notation des groupes de symétrie
8. Organigramme d'identification du groupe de symétrie d'une molécule

III- Tableaux de caractères

1. Rappel sur le calcul matriciel : algèbre des matrices
2. Somme directe de deux matrices
3. Caractère d'une matrice et matrice conjuguée
4. Représentation matricielle du groupe de symétries
5. Représentation réductible et irréductible
6. caractère d'une représentation irréductible
7. Réduction d'une représentation réductible
8. Décomposition canonique d'une représentation
9. Détermination des bases de représentations d'une décomposition
10. Opérateurs de projection
11. Tables de caractère des principaux groupes de symétrie.

Unité d'enseignement : UEF1

Matière : Structure et spectroscopie de molécules diatomiques

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Approximation de base.

Ecriture de l'Hamiltonien d'une molécule,

Séparation des mouvements nucléaires et les mouvements électroniques : approximation Born-Oppenheimer,

Séparation entre les mouvements des électrons : approximation orbitale.

Forme de la fonction d'onde totale d'une molécule dans le cadre de l'approximation orbitale : Application du principe de Pauli

Approximation CLOA

Chapitre 2 : Approche qualitative dans l'étude des structures de molécules diatomiques.

Interaction de deux orbitales atomiques identique : les molécules diatomiques homonucléaires,

Interaction de deux orbitales atomiques différentes : les molécules diatomiques hétéronucléaires

Interaction entre 3 orbitales : molécules AH

Interactions entre 4 orbitales : molécules A₂

Interactions entre 4 orbitales : molécule AB

Propriétés électroniques de molécules diatomiques

Chapitre 4 : Spectres rotovibrationnels de molécules diatomiques.

Hamiltonien et équation de Schrödinger indépendante du temps

Séparation des mouvements de translation et les mouvements internes

Approximation du rotateur rigide

Énergie d'interactions interatomiques et approximation de l'oscillateur harmonique

Spectres rotovibrationnels IR et Raman

Chapitre 3 : spectre électronique de molécules diatomiques.

Configurations électroniques de molécules diatomiques : Etats électroniques

Symétrie des états électroniques , vibroniques et rovibroniques

Règles de sélection

Couplage entre les moments angulaires électronique et rotationnel

Spectres vibroniques de molécules diatomique

Unité d'enseignement : UEM1

Matière : Travaux pratique de thermochimie

Contenu de la matière :

5 manipulations de thermochimie, suivant les disponibilités du matériel et des produits chimiques.

Unité d'enseignement : UEM1

Matière : Travaux pratique de cinétique chimique

Contenu de la matière :

5 manipulations de cinétique homogène et hétérogène suivant les disponibilités du matériel et des produits chimiques.

Unité d'enseignement : UEM1

Matière : Informatique pour la chimie I

Contenu de la matière :

Chapitre I : Notions générales sur les systèmes d'exploitation

Définitions

Le système d'exploitation Windows

Le système d'exploitation Linux.

Chapitre II : Traitement statistique et graphique de données

expérimentales

Initiation à un tableur

Initiation à une application pour tracer des courbes.

Chapitre III : Représentation et visualisation de molécules

Edition de structures moléculaires 2D

Edition et visualisations de structures 3D

Unité d'enseignement : UEM1

Matière : Chimiométrie

Contenu de la matière :

Partie A : Plans d'expériences

1. Rappels statistiques
2. Plans de pesées : matrices d'Hadamard
3. Modélisation des essais : Régression multiple
4. Matrice d'Hadamard
5. Plans factoriels complets FFD
6. Surface de réponse Plans composites CCD

Partie B : Analyse de données

1. Analyse en Composantes Principales
2. Analyse Factorielle des Correspondances

Unité d'enseignement : UED 1

Matière : Chimie organique polyfonctionnelle

Contenu de la matière :

- 1- Composés polyfonctionnels
 - polyènes
 - polyhalogénures
 - polyaldehydes et polycétones
 - polyacides
 - aldéhydes et cétones insaturés
 - acides insaturés
 - hydroxyacides
 - cétoacides

2- hétérocycle

- 6-membres et un hétéroatome N et S (pyridine, quinoléines et isoquinolines).
- 5-membres et un hétéroatome N, S et O (furane, thiophène, pyrrole).

3- nomenclature des composés hétérocycliques a deux hétéroatomes.

Unité d'enseignement : UED 1

Matière : Chimie des polymères

Contenu de la matière :

I. Présentation générale

- Polymères naturels et synthétiques ; aspects économiques
- Masses molaires moyennes et distribution
- Structure moléculaire et nomenclature

II. Chimie macromoléculaire

- Réactions de polymérisation en chaîne (radicalaire, ionique, coordination)
- Polymérisations par étapes
- Techniques de préparation

III. Physico-chimie macromoléculaire

- Statistique de chaîne et conformation
- Thermodynamique des systèmes macromoléculaires
- Techniques expérimentales de caractérisation (pression osmotique, viscosité, chromatographie d'exclusion)

IV. Matériaux polymères

- Polymères amorphes et transition vitreuse
- Polymères semi-cristallins : relations structure/propriétés
- Propriétés mécaniques à l'état solide (tests mécaniques et comportements).

Unité d'enseignement : UED 1

Matière : Chimie thérapeutique

Contenu de la matière :

- Découverte des médicaments
- Principales classes et mode d'action des médicaments.
- Introduction à la pharmacologie.
- Relations structure-activité.
- Médicaments qui agissent sur l'ADN
- Modes de vectorisation des principes actifs

Unité d'enseignement : UET 1

Matière : Ethique et déontologie

Contenu de la matière :

Le cours développe les principaux termes de la charte d'éthique et de déontologie

Universitaires.

Semestre : 6

Unité d'enseignement : UEF 1

Matière : Electrochimie

Contenu de la matière :

Chapitre I : Conductivité des solutions électrolytiques

1. Notions fondamentales.
2. Diverses conductivités.
3. Mobilité ionique.
4. Nombre de transport. Méthode de Hittorf
5. Conductivité théorie et applications.
6. Lois d'Arrhenius. Ostwald. Kohlraush.
7. Effets électrophomérique et de Relaxation.
8. Loi limite de Debey-Onsager.
9. Application : colubilité, vitesse de réaction-complexe dosage conductimétriques.

Chapitre II :Solvatation des ions.

1. Idées générales.
2. Hydratation des ions.
3. Rayons de Stocks.
4. Énergie d'hydratation – cycle de Born-Halver.
5. Coefficient d'hydratation.
6. Mobilité de H⁺

Chapitre III : Thermodynamique des solutions électrolytiques :

1. Activité ionique et potentiel chimique standard d'un ion.
2. Grandeurs thermodynamiques moyennes.
3. Force ionique (Lewis et Ranal)
4. Théorie de Debye et Hückel.

Unité d'enseignement : UEF1

Matière : Chimie de surface

Contenu de la matière :

Partie I : Tension superficielle et adsorption

Notion de la tension activité

1. Système dispersé
2. Adsorption physique
3. Adsorption chimique
4. Chaleur d'adsorption
5. Isothermes d'adsorption
6. Théories de l'adsorption :
7. Théorie de Langmuir
8. Théorie BET
9. Equation de FREUNDLICH

Partie II : Mesure des aires spécifiques

Partie III : Détermination de la chaleur d'adsorption

Partie IV : Préparation des catalyseurs solides

Partie V : Adsorption de gaz sur des solides

Partie VI : Adsorption de liquide par des solides

Partie VIII : Applications

Unité d'enseignement : UEF1

Matière : Structure et spectroscopie de molécules polyatomiques

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Cadre du champ moyen :

A- Méthode de Huckel simple : Application au systèmes pi de moléculaires organiques conjuguées

B- Méthode de Huckel étendue : Application aux électrons sigma et pi de molécules organiques

Chapitre 2 : Cadre du champ auto cohérent : Méthode HF

1. Principe de la méthodologie Hartree-Fock
2. Opérateur de Fock
3. La procédure SCF
4. La limite Hartree-Fock
5. Equations de Roothan
6. Bases d'orbitales atomiques et méthodes ab initio
7. Méthodes semi empiriques
8. Analyse de population

Chapitre 3 : Approche qualitative dans l'étude de la structure électronique de molécules polyatomiques simples

1. Méthode des orbitales de fragments.
2. Propriétés de symétrie des orbitales
3. Interactions entre les orbitales de fragment.
4. Diagrammes de corrélation des orbitales moléculaires
5. Orbitales moléculaires de molécules AB_n
6. Orbitales moléculaires de molécules simples organiques simple

Chapitre 3 : spectre électronique de molécules polyatomiques.

1. Types généraux de transitions électroniques
2. Règles de sélection de transitions électroniques.
3. Spectres électroniques de faible résolution de petites molécules
4. Spectres électroniques de faible résolution de molécules organiques conjuguées

Chapitre 4 : Spectres IR et RAMAN de molécules polyatomiques.

1. Rotation de molécules polyatomiques.
2. Vibration de molécules polyatomiques

Spectres IR et RAMAN de molécules polyatomiques

Unité d'enseignement : UEF1

Matière : Cristallographie

Contenu de la matière :

Partie I : Structure Cristallites

1. Réseau périodique
2. Opérations de symétries
3. Réseau réciproque zone de Brillouin.
4. Les différents types de réseau
5. Indicateur de Miller.
6. Structures cristallines simples.

Partie II : Étude expérimentale à l'aide des rayons X :

1. Production et détection des rayons X
2. Diffraction des rayons X par un atome
3. Diffraction des rayons X par un cristal, facteur de structure.
4. Méthodes expérimentales (lamelle, cristal, tournant, Debye-Scherrer)

Unité d'enseignement : UEM1

Matière : TP de chimoinformatique

Contenu de la matière :

Partie I: Recherche de groupes de symétrie en utilisant un éditeur de structures 3D de molécule.

Partie II : Mise au point de programmes pour la chimie

Partie III: Manipulation de logiciels de chimie quantique

1. Méthodes de Huckel simple et étendue: CACAO
2. Les méthodes semi-empiriques : MOPAC

Unité d'enseignement : UEM1

Matière : Travaux pratique de thermodynamique des solutions

Contenu de la matière :

5 manipulations dont les thèmes sont liés à la thermodynamique des solutions et les diagramme d'équilibre suivant les disponibilités du matériel et des produits chimiques.

Unité d'enseignement : UEM1

Matière : Travaux pratique d'Electrochimie

Contenu de la matière :

5 manipulations d'électrochimie, suivant les disponibilités du matériel et des produits chimiques.

Unité d'enseignement : UEM1

Matière : Travaux pratiques de chimie de surface

Contenu de la matière :

5 manipulations de chimie de surface, suivant les disponibilités du matériel et des produits chimiques.

Unité d'enseignement : UED 1

Matière : Chimie de coordination

Contenu de la matière :

Chapitre 1 :

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

Chapitre II

- a. Stabilité de complexes
- b. Constantes de formation,
- c. Notions de réactivité

Chapitre III

- a. Diagrammes d'équilibres liquide-solide dans les systèmes binaires :
- b. solutions solides

Unité d'enseignement : UED 1

Matière : corrosion

Contenu de la matière :

Chapitre I : Généralités et rappels

Chapitre II : Aspect thermodynamique de la corrosion

Chapitre III : Mécanisme et aspect cinétique de la corrosion

Chapitre IV : Méthodes de protection contre la corrosion

Unité d'enseignement : UED 1

Matière : Pollution chimique de l'eau

Contenu de la matière :

Chapitre I : Généralités et définitions

Chapitre II : Pollution chimique de l'eau

- 1- Les principaux polluants
- 2- Aspects thermodynamiques de la pollution de l'eau
- 3- Aspects cinétiques de la pollution de l'eau
- 4- Méthodes de dépollutions
- 5-

Unité d'enseignement : UET 1

Matière : Culture Scientifique

Contenu de la matière :

Etude de livres et d'articles de vulgarisation sur des thèmes liés aux sciences de la matière, en arabe, français et anglais. Faire des traductions dans une langue autre que celle du livre ou l'article.