

5C201 Chimie analytique et bioanalyse (I) : Méthodes séparatives avancées et chimiométrie									
Mots clés : chromatographies en phase liquide, gazeuse et supercritique ; interactions ; modes de détections ; traitement de l'échantillon ; traitement des données ; chimiométrie ; plans d'expériences									
Responsable Jérôme VIAL, MdC, ESPCI Paris PSL, Laboratoire Sciences Analytiques, Bioanalytiques et Miniaturisation									
ECTS 6	Cours 48h	TD	TP	Tutorat 2h	Ecrit 100%	CC	TP	Oral	Eval. répartie oui
<p>Descriptif de l'UE Pour répondre à des exigences croissantes en analytique concernant tous les domaines de la société nous nous proposons dans cette UE de former les étudiants aux outils analytiques les plus récents. Ainsi ils vont acquérir les compétences dans les différentes méthodes chromatographiques, du couplage avec la spectrométrie de masse et du traitement de l'échantillon qui vont leur permettre de gérer des échantillons complexes à la fois par le nombre de composés et la gamme de concentration couverte. Ces exigences nécessitent également la mise en œuvre d'outils méthodologiques et chimiométriques performants à la fois pour la conception des expériences à réaliser, pour l'interprétation des résultats et afin de garantir le meilleur niveau de fiabilité possible.</p>									
<p>Objectifs d'apprentissage Les étudiants s'approprient les outils nécessaires pour développer des techniques chromatographiques et de traitement de l'échantillon afin de répondre aux demandes actuelles. Les étudiants vont acquérir les bases statistiques nécessaires pour exprimer leurs résultats d'analyse et construire de manière optimale les essais expérimentaux à réaliser. Il s'agit d'une formation adossée à une recherche académique de pointe menée en lien étroit avec l'industrie. l'UE s'adresse à un public diversifié qui se destine à une carrière industrielle ou académique dans le domaine des sciences séparatives.</p>									
<p>Prérequis Les étudiants devront maîtriser les bases des techniques séparatives et de la chimie des solutions qui leur seront indispensables pour appréhender les concepts de chromatographie avancée et de traitement de l'échantillon. En ce qui concerne la chimiométrie aucun prérequis statistique n'est nécessaire mais un bagage mathématique minimum est requis. L'attention sera toutefois plus portée sur les interprétations physico-chimiques que sur les calculs qui sont effectués par la plupart des logiciels commerciaux.</p>									
Langue ⁽¹⁾	Cours, TD, TP Français							Documents Anglais	Bibliographie

(1) D'une manière générale, les documents de cours sont à rédiger en anglais. Les sujets d'examen sont en anglais ou accompagnés d'une explication en anglais s'il y a des étudiants non francophones.

Fonctionnement de l'UE

Cette partie n'est pas limitée en longueur. Elle sera reprise pour le site web sous forme de fichier pdf.

Cette partie pourrait détailler d'un côté le contenu abordé, par exemple sous forme d'un plan de cours, et de l'autre côté les méthodes pédagogiques employées. On pourrait aussi préciser le partage de l'UE entre différents enseignants, donner un calendrier ou dresser une liste de livres ou de ressources complémentaires.

Méthodes séparatives (14 h + 2 h Tutorat):

- Chromatographiques en phase liquide approfondies : nouveaux développements pour les séparations rapides et à haut débit, intérêts et contraintes de la miniaturisation, complémentarité des mécanismes de rétention, chiralité.

Chimie

- Chromatographie en phase gazeuse : derniers développements
- Chromatographie en phase supercritique
- Modes de détection couplés (hors spectrométrie de masse)

Méthodes de traitement de l'échantillon (12h):

- Traitement d'échantillons liquides : extraction liquide-liquide, extraction sur phase solide, méthodes de préconcentration/purification pour l'analyse de traces.
- Traitement d'échantillons solides : extraction par les fluides supercritiques ou en solvants chauds sous micro-ondes ou sous pression.
- Miniaturisation des techniques d'extraction exhaustive et non exhaustives
- Couplage à l'analyse chromatographique.

Couplage chromatographie en phase liquide-spectrométrie de masse (4 h) Outils statistiques pour l'exploitation des résultats et la construction des essais expérimentaux (18h):

- Statistiques descriptives : histogramme, moyenne, écart-type...
- Variables aléatoires
- Distributions : Loi normale et dérivées
- Echantillon aléatoire
- Estimation ponctuelle et par intervalle : intervalle de confiance d'une moyenne, d'un écart-type, variance intraclasse
- Test d'hypothèse : test de justesse, comparaison de variances et d'espérances mathématiques
- Analyse de la Variance à un et deux facteurs contrôlés ; détermination de l'influence de facteurs contrôlés
- Régression linéaire : paramètres statistiques de la régression et utilisation
- Plans d'expériences : factoriels complets, factoriels fractionnaires (théorie des alias), plans pour surface de réponse, calcul des effets, détermination des effets significatifs, modèles