

ANNEXE

Annexe 1. Classification périodique des éléments	2
Annexe 2. Détermination du Z-score	3
Annexe 3. Limites de détection et de quantification.....	3
Annexe 4. Table des nombres d'onde des vibrations d'élongation et de déformation	4
Annexe 5. Table des déplacements chimiques en spectroscopie RMN ¹ H	5
▫ Domaines de déplacements chimiques des protons des groupes M (méthyle CH ₃ , méthylène CH ₂ et méthyne CH) en α ou en β de groupes caractéristiques.....	5
▫ Domaines de déplacements chimiques de divers protons.....	5
Annexe 6. Table des déplacements chimiques en spectroscopie RMN ¹³ C	6
Annexe 7. Calcul de la différence de température logarithmique pour un échangeur thermique.....	7

Annexe 1. Classification périodique des éléments

Numéros atomiques $Z(X)$, masses molaires $M(X)$ et électronégativités $\chi(X)$ selon l'échelle de Allred et Rochow d'un extrait de la classification périodique des éléments.

Groupes :	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Périodes																		
n = 1																		He
	H																	He
	Hydrogène																	Helium
$Z(X)$	1																	2
$M(X)$	1,001																	4
$\chi(X)$	2,1																	(5,5)
n = 2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
	Lithium	Beryllium											Bore	Carbone	Azote	Oxygène	Fluor	Néon
$Z(X)$	3	4											5	6	7	8	9	10
$M(X)$	6,94	9,01											10,81	12,01	14,01	16	19	20,18
$\chi(X)$	0,97	1,47											2,01	2,5	3,07	3,5	4,1	(4,84)
n = 3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
	Sodium	Magnésium											Aluminium	Silicium	Phosphore	Soufre	Chlore	Argon
$Z(X)$	11	12											13	14	15	16	17	18
$M(X)$	22,99	24,31											26,98	28,09	30,97	32,06	35,45	39,95
$\chi(X)$	1,01	1,23											1,47	1,74	2,06	2,44	2,83	(3,2)
n = 4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
	Potassium	Calcium	Scandium	Titane	Vanadium	Chrome	Manganèse	Fer	Cobalt	Nickel	Cuivre	Zinc	Gallium	Germanium	Arsenic	Sélénium	Brome	Krypton
$Z(X)$	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
$M(X)$	39,10	40,08	44,96	47,9	50,94	52	54,94	55,85	58,93	58,71	63,54	65,37	69,72	72,59	74,92	78,96	79,9	83,8
$\chi(X)$	0,91	1,04	1,2	1,32	1,45	1,56	1,6	1,64	1,7	1,75	1,75	1,66	1,82	2,02	2,2	2,48	2,74	(2,94)
n = 5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
	Rubidium	Strontium	Yttrium	Zirconium	Niobium	Molybdène	Technétium	Ruthénium	Rhodium	Palladium	Argent	Cadmium	Indium	Etain	Antimoine	Tellure	Iode	Xénon
$Z(X)$	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
$M(X)$	85,47	87,62	88,91	91,22	92,91	95,94	(99)	101,01	102,91	106,4	107,87	112,4	114,82	118,69	121,75	127,6	126,90	131,3
$\chi(X)$	0,89	0,99	1,11	1,22	1,23	1,3	1,36	1,42	1,45	1,35	1,42	1,46	1,49	1,72	1,82	2,01	2,21	(2,4)

Annexe 2. Détermination du Z-score

Dans le cas d'un unique mesurage sur le support de comparaison, le Z-score Z_i de chaque laboratoire se calcule de la façon suivante :

$$Z_i = \frac{y_i - \bar{y}}{s(y_i)}$$

avec :

- y_i : valeur du mesurage obtenu pour le laboratoire considéré
- \bar{y} : valeur moyenne des mesurages de tous les laboratoires
- $s(y_i)$: écart-type des mesurages obtenus par les laboratoires

Résultats

$ Z_i < 2$: résultats corrects	
$2 \leq Z_i < 3$: résultats douteux	=> surveillance ou action préventive
$ Z_i \geq 3$: résultats non acceptables	=> action corrective nécessaire

Annexe 3. Limites de détection et de quantification

$$\text{Limite de détection } L_D = \frac{3 s(b)}{a} \qquad \text{Limite de quantification } L_Q = \frac{10 s(b)}{a}$$

Avec «**a**» : le coefficient directeur de la droite d'étalonnage
«**s(b)**» : l'écart-type sur la série de mesures du blanc

Annexe 4. Table des nombres d'onde des vibrations d'élongation et de déformation

C_{tet} : C tétragonal

C_{tri} : C trigonal >C=

C_{di} : C digonal -C≡

Liaison	Nature	Nombre d'onde (cm ⁻¹)	Intensité F : fort ; m : moyen ; f : faible
O-H alcool libre	Élongation	3590-3650	F (fine)
O-H alcoollié	Élongation	3200-3600	F (large)
N-H amine	Élongation	3300-3500	m
N-H amide	Élongation	3100-3500	F
C _{di} -H	Élongation	~ 3300	M ou f
C _{tri} -H	Élongation	3030-3100	m
C _{tri} -H aromatique	Élongation	3000-3100	m
C _{tet} -H	Élongation	2850-2970	F
C _{tri} -H aldéhyde	Élongation	2700-2900	m (2 bandes)
O-H acide carboxylique	Élongation	2500-3200	F à m (large)
C≡C	Élongation	2100-2260	f
C≡N nitriles	Élongation	2200-2260	F ou m
C=O anhydride	Élongation	1800-1850 1740-1790	F
C=O chlorure d'acide	Élongation	1790-1815	F
C=O ester	Élongation	1735-1750	F
C=O aldéhyde et cétone	Élongation	1700-1740 abaissement de ~ 20 à 30 cm ⁻¹ si conjugaison	F
C=O acide carboxylique	Élongation	1700-1725	F
C=O amide	Élongation	1650-1700	F
C=C	Élongation	1620-1690	M
C=C aromatique	Élongation	1450-1600	Variable ; 3 ou 4 bandes
N=O (de -NO ₂) Conjugué	Élongation	1500-1550 1290-1360	F
N=N	Élongation	1400-1500	f ; parfois invisible
C=N	Élongation	1640-1690	F ou m
N-H amine ou amide	Déformation	1560-1640	F ou m
C _{tet} -H	Déformation	1430-1470	F
C _{tet} -H (CH ₃)	Déformation	1370-1390	F ; 2 bandes
O-H	Déformation	1260-1410	F
P=O	Élongation	1250-1310	F
C _{tet} -O-C _{tet} (étheroxydes)	Élongation	1070-1150	F
C _{tet} -OH (alcools)	Élongation	1010-1200	
C _{tet} -O-C _{tri} (esters) C _{tri} -O-C _{tri} (anhydrides)	Élongation	1050-1300	F ; 1 ou 2 bandes
C-N	Élongation	1020-1220	M
C-C	Élongation	1000-1250	F
C-F	Élongation	1000-1040	F
C _{tri} -H de -HC=CH- (E) (Z)	Déformation Déformation	960-970 670-730	F m
C _{tri} -H aromatique monosubstitué	Déformation	730-770 et 680-720	F ; 2 bandes
C _{tri} -H aromatique o-disubstitué m-disubstitué p-disubstitué	Déformation Déformation Déformation	735-770 750-800 et 680-720 800-860	F F et m ; 2 bandes F
C _{tri} -H aromatique 1,2,3trisubstitué 1,2,4trisubstitué 1,3,5trisubstitué	Déformation Déformation Déformation	770-800 et 685-720 860-900 et 800-860 810-865 et 675-730	F et m ; 2 bandes F et m ; 2 bandes F et m ; 2 bandes
C _{tet} -Cl	Élongation	600-800	F
C _{tet} -Br	Élongation	500-750	F

Annexe 5. Table des déplacements chimiques en spectroscopie RMN ¹H

▫ Domaines de déplacements chimiques des protons des groupes M (méthyle CH₃, méthylène CH₂ et méthyne CH) en α ou en β de groupes caractéristiques.

type de proton	δ en ppm	type de proton	δ en ppm
CH ₃ -SiR ₃	0,0-1,0		
M-CH ₂ R	0,8-1,6	M-C-CH ₂ R	0,9-1,6
M-C=C	1,6-2,0	M-C-C=C	1,0-1,8
M-C≡C	1,7-2,8	M-C-C≡C	1,2-1,8
M-Ph	2,2-2,8	M-C-Ph	1,1-1,8
M-F	4,2-4,8	M-C-F	1,5-2,2
M-Cl	3,0-4,0	M-C-Cl	1,5-2,0
M-Br	3,4-4,1	M-C-Br	1,8-1,9
M-I	3,1-4,2	M-C-I	1,7-2,1
M-OH et M-OR	3,2-3,6	M-C-OH et M-C-OR	1,2-1,8
M-OPh	3,8-4,6	M-C-OPh	1,3-2,0
M-O-CO-R	3,6-5,0	M-C-O-CO-R	1,3-1,8
M-O-CO-Ph	3,8-5,0	M-C-O-CO-Ph	1,6-2,0
M-CHO et M-CO-R	2,1-2,6	M-C-CHO	1,1-1,7
M-CO-Ph	3,8-5,0	M-C-CO-R	1,1-1,8
M-CO-OH et M-CO-OR	1,8-2,6	M-C-CO-Ph	1,1-1,9
M-CO-NR ₂	1,8-2,2	M-C-CO-OR	1,1-1,9
M-C≡N	2,2-3,0	M-C-CO-NR ₂	1,1-1,8
M-NH ₂ et M-NR ₂	2,2-3,0	M-C-C≡N	1,2-2,0
M-N ⁺ R ₃	3,0-3,6	M-C-N ⁺ R ₃	1,4-2,0
M-NH-CO-R	3,0-3,8	M-C-NH-CO-R	1,1-1,9
M-NO ₂	4,1-4,4	M-C-NO ₂	1,6-2,5
M-SH et M-SR	2,1-5,1	M-C-SH et M-C-SR	1,3-1,9

▫ Domaines de déplacements chimiques de divers protons

type de proton	δ / ppm	type de proton	δ / ppm
>C(cycle)=CH ₂	4,6	-CO-OH	8,5-13
>C=CH ₂	5,3	>C=C-OH	11-17
-C=CH-	5,1	PhH	7,2
-C=CH- (cyclique)	5,3	R-OH	0,5-5,5
R-C≡C-H	3,1	Ar-OH	4,0-7,5
Ar-H	7,0-9,0	Ar-OH (avec liaison H intramoléculaire)	5,5-12,5
>C=CH-CO-	5,9	R-NH-	0,5-3,0
-CH=C-CO-	6,8	Ar-NH	3,0-5,0
R-CHO	9,9	R-CO-NH-	5,0-8,5
Ar-CHO	9,9	CHCl ₃	7,2
H-CO-O-	8,0	H ₂ O	≈5,0
H-CO-N<	8,0		

Annexe 6. Table des déplacements chimiques en spectroscopie RMN ¹³C

Alcanes	δ / ppm	Dérivés halogénés	δ / ppm	Acides carboxyliques et dérivés d'acides	δ / ppm
Cyclopropane Cycloalcane RCH ₃ R ₂ CH ₂ R ₃ CH R ₄ C	0-8 5-25 5-35 15-50 30-60 25-40	CH ₃ X RCH ₂ I RCH ₂ Br RCH ₂ Cl R ₂ CHX R ₃ CX	5-25 10-40 20-40 25-90 30-60 35-75	RCOOH RCOOR' RCOOCR ₁ R ₂ R ₃ RCONH ₂ RCOCl (RCO) ₂ O	160-190 150-180 70-85 150-170 140-170 150-170
Hydrocarbures insaturés	δ / ppm	Éther-oxydes ; alcools	δ / ppm	Amines, imines, nitriles	δ / ppm
Aromatiques Alcènes Alcyne	110-175 100-150 50-95	CH ₃ -O- R-CH ₂ -O- R ₁ R ₂ CH-O- R ₁ R ₂ R ₃ C-O-	45-60 50-70 65-80 70-85	CH ₃ NH ₂ RCH ₂ NH ₂ R ₂ CHNH ₂ R ₃ CNH ₂ R ₂ C=NR RCN	10-45 20-70 50-70 60-75 145-160 115-125
Composés carbonylés	δ / ppm				
RCOR' RCHO	190-220 185-205				

Annexe 7. Calcul de la différence de température logarithmique pour un échangeur thermique

$$\Delta T_{LM} = \frac{\Delta T_2 - \Delta T_1}{\ln\left(\frac{\Delta T_2}{\Delta T_1}\right)}$$

Avec : $\Delta T_1 = T_{CE} - T_{FS}$

$$\Delta T_2 = T_{CS} - T_{FE}$$

Avec : T_{CE} : la température du fluide chaud en entrée de l'échangeur thermique

T_{CS} : la température du fluide chaud en sortie de l'échangeur thermique

T_{FE} : la température du fluide froid en entrée de l'échangeur thermique

T_{FS} : la température du fluide froid en sortie de l'échangeur thermique