

**Fiche descriptive du parcours type du master
Theoretical Chemistry and Computational Modeling (TCCM)
(Erasmus Mundus of Science)**

Cette fiche parcours est complémentaire et indissociable de la [fiche Mention Chimie](#)

Etablissement

Université Toulouse III Paul Sabatier

Etablissements partenaires :

- Universidad Autonoma de Madrid (Espagne) - coordination
- University of Groningen (Pays-Bas)
- Universidade do Porto (Portugal)
- KU Leuven (Belgique)
- Università degli Studi di Perugia (Italie)
- Universitat de Valencia (Espagne)

Secteurs d'activité et types d'emplois accessibles par le détenteur de ce parcours type

Secteurs d'activité :

- C 20 : Industrie chimique
- C 21 : Industrie pharmaceutique
- M 72 : Recherche-développement scientifique

Types d'emplois :

- Ingénieur / Ingénieure d'essais en études, recherche et développement
- Ingénieur / Ingénieure de conception et développement en industrie
- Ingénieur Chimiste en modélisation moléculaire
- Analyste-programmeur / Analyste-programmeuse scientifique informatique
- Développeur / Développeuse d'application
- Développeur / Développeuse informatique
- Ingénieur / Ingénieure de conception informatique
- Ingénieur / Ingénieure d'étude logiciel informatique
- Ingénieur technico-commercial en sociétés de service ou de commercialisation de logiciels à caractère scientifique
- Formateur

Codes ROME :

- H1206 : Management et ingénierie études, recherche et développement industriel
- M1802 : Expertise et support technique en systèmes d'information
- M1805 : Etudes et développement informatique

Activités et compétences spécifiques du parcours type

Activités visées par le parcours-type

- Prédiction de nouvelles structures moléculaires et leurs propriétés par des simulations mathématiques et numériques multi-échelles
- Conception de modèles théoriques (calcul, simulation, modélisation, ...)
- Identification, conception et test in silico des nouvelles molécules ou matériaux, des nouvelles voies de synthèse ou encore de nouveaux procédés
- Evaluation de la faisabilité d'un projet, élaboration des propositions techniques
- Développement de méthodes de modélisation ou intégration et adaptation de solutions existantes
- Présentation et promotion d'un progiciel ou formation des utilisateurs aux applications informatiques livrées
- Programmation dans des langages informatiques scientifique (FORTRAN, C, C++)
- Conception de logiciels scientifiques, notamment dans le domaine de la simulation en chimie et science des matériaux
- Intervention dans tout domaine informatique / sciences et techniques

Compétences attestées pour pouvoir exercer ces activités :

- Choisir la méthode théorique la plus pertinente pour modéliser un problème expérimental en chimie, et choisir le logiciel correspondant, parmi les principaux logiciels en chimie théorique (Maîtrise)
- Développer des outils informatiques (FORTRAN, C ou C++, en particulier) pour le traitement des problèmes rencontrés en chimie, ou à l'interface entre chimie et physique, pharmacologie, biochimie (Maîtrise)
- Analyser les résultats obtenus par un calcul de chimie théorique, exploiter ces résultats pour définir des stratégies de recherche (Expertise)

Spécialités de Formation

Code(s) NSF

- 116b : Méthodes de mesure, d'analyse chimique ; Informatique de la chimie
- 326t : Programmation, mise en place de logiciels
- 333t : Education et transfert de connaissances

Mots clés

CHIMIE THEORIQUE, CHIMIE COMPUTATIONNELLE, MODELISATION, CHEMOINFORMATIQUE, INFORMATIQUE

Modalités d'accès à cette certification

Les modalités du contrôle permettent de vérifier l'acquisition de l'ensemble des aptitudes, connaissances et compétences constitutives du diplôme. Celles-ci sont appréciées soit par un contrôle continu et régulier, soit par un examen terminal, soit par ces deux modes de contrôle combinés.

Chaque bloc d'enseignement a une valeur définie en crédits européens (ECTS). Le nombre de crédits par unité d'enseignement est défini sur la base de la charge totale de travail requise et tient donc compte de l'ensemble de l'activité exigée : volume et nature des enseignements dispensés, travail personnel requis, des stages, mémoires, projets et autres activités. Pour l'obtention du diplôme de master, une référence commune est fixée correspondant à l'acquisition de 120 ECTS au-delà du grade de licence.

Le parcours est accessible par la voie de l'apprentissage

NON

Pour plus d'information

Statistiques :

<http://www.univ-tlse3.fr/observatoire-de-la-vie-etudiante-239350.kjsp>

ou <http://www.univ-tlse3.fr/ove>

Lieu(x) de certification :

Université Toulouse III - Paul Sabatier - 118 route de Narbonne 31062 TOULOUSE CEDEX 9

Lieu(x) de préparation à la certification déclaré(s) par l'organisme certificateur :

Toulouse

Historique :

Nouvelle appellation	Ancienne appellation
European Master « Theoretical Chemistry and Computational Modeling » (EMTCCM) – Erasmus+	Erasmus Mundus Master « Theoretical Chemistry and Computational Modeling » (TCCM)

Liste des liens sources

Site Internet de l'autorité délivrant la certification

<http://www.univ-tlse3.fr>