

PÉRIODE D'ACCRÉDITATION : 2016 / 2021

UNIVERSITÉ PAUL SABATIER

---

# SYLLABUS MASTER

## Mention Chimie

### M1 chimie théorique et modélisation

---

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

2019 / 2020

13 DÉCEMBRE 2019

# SOMMAIRE

---

SCHÉMA ARTICULATION LICENCE MASTER . . . . .	3
PRÉSENTATION . . . . .	4
PRÉSENTATION DE LA MENTION ET DU PARCOURS . . . . .	4
Mention Chimie . . . . .	4
Parcours . . . . .	4
PRÉSENTATION DE L'ANNÉE DE M1 chimie théorique et modélisation . . . . .	4
RUBRIQUE CONTACTS . . . . .	6
CONTACTS PARCOURS . . . . .	6
CONTACTS MENTION . . . . .	6
CONTACTS DÉPARTEMENT : FSI.Chimie . . . . .	6
Tableau Synthétique des UE de la formation . . . . .	7
LISTE DES UE . . . . .	9
GLOSSAIRE . . . . .	37
TERMES GÉNÉRAUX . . . . .	37
TERMES ASSOCIÉS AUX DIPLOMES . . . . .	37
TERMES ASSOCIÉS AUX ENSEIGNEMENTS . . . . .	37

# SCHÉMA ARTICULATION LICENCE MASTER



MEEF : cf. page 10, Projet métiers de l'enseignement

# PRÉSENTATION

---

## PRÉSENTATION DE LA MENTION ET DU PARCOURS

### MENTION CHIMIE

La formation offerte par le master chimie propose cinq grandes orientations en chimie verte, chimie analytique, chimie santé, chimie théorique et préparation aux métiers de l'enseignement.

L'objectif principal de la mention est de former des cadres supérieurs chimistes autonomes pour occuper des postes à responsabilité en milieu académique ou dans les secteurs d'activité comme ceux de l'industrie pharmaceutique, l'agroalimentaire, l'environnement, les cosmétiques, la parachimie, les détergents, les matériaux et l'instrumentation.

La formation permet également d'acquérir des compétences transverses importantes pour l'insertion professionnelle telles que : autonomie, communication en français et en anglais, gestion de projet, réalisation d'études...

Le master chimie propose une orientation progressive dans le parcours choisi.

La première année comporte une part importante de tronc commun (60%), et 40% d'enseignements spécifiques à la spécialité choisie.

La deuxième année au contraire est fortement axée sur l'enseignement de spécialité (85%) et ne comporte que 15% d'enseignements de tronc commun.

Des stages sont inclus à la formation (minimum 8 semaines en M1, 5 à 6 mois en M2).

### PARCOURS

**Objectifs** : cette formation vise à donner aux étudiants une réelle double compétence en chimie théorique et en informatique. En plus de proposer une formation généraliste, sa particularité est de s'appuyer sur des enseignements à distance proposés par les quatre sites universitaires du Pôle Sud-Ouest du Réseau Français de Chimie Théorique, tenant compte des spécificités des laboratoires de recherche de chacun des centres.

**Et après** : le parcours Chimie Théorique et Modélisation du master 1 Chimie permet d'intégrer de droit le master 2 Chimie Théorique et Modélisation.

## PRÉSENTATION DE L'ANNÉE DE M1 CHIMIE THÉORIQUE ET MODÉLISATION

Le parcours Master 1 Chimie Théorique et Modélisation, labellisé « Cursus Master en Ingénierie », est un des 5 parcours proposés par le Master 1 Chimie. Il est commun Mundus in Theoretical Chemistry and Computational Modeling (TCCM).

La part d'enseignements spécifiques du parcours Chimie Théorique et Modélisation est de 30 % et est déclinée en 5 unités d'enseignements :

- Projet chimie théorique (Toulouse)
- Interaction rayonnement-matière (Pau)
- Thermodynamique statistique I (Bordeaux)
- Matériaux à propriétés électroniques remarquables (Toulouse)
- Spectroscopie théorique (Montpellier)

55 % des enseignements sont communs à l'ensemble des 5 parcours et sont déclinés en 6 unités d'enseignement :

- Professionnalisation
- Caractérisations
- Sécurité - Normes - Règlementation
- Formulation
- Anglais - Bibliographie - gestion de projet
- Projet intégré

Le deuxième semestre comporte un stage de 8 semaines qui peut être fait dans un laboratoire académique, dans l'industrie, en France ou à l'étranger. Il donne l'occasion de se placer dans une situation préprofessionnelle et mettre en pratique les notions fondamentales acquises.

Les 15% restants sont aux choix parmi les UE proposées par les autres parcours plus deux UEs à choix spécifiques

- Thermodynamique statistique II (Bordeaux)
- Propriétés structurales et électroniques de la matière (Pau)

# RUBRIQUE CONTACTS

---

## CONTACTS PARCOURS

### RESPONSABLE M1 CHIMIE THÉORIQUE ET MODÉLISATION

LEININGER Thierry

Email : [Thierry.Leininger@irsamc.ups-tlse.fr](mailto:Thierry.Leininger@irsamc.ups-tlse.fr)

MARTIN VACA Blanca Maria

Email : [bmv@chimie.ups-tlse.fr](mailto:bmv@chimie.ups-tlse.fr)

Téléphone : 05 61 55 77 37

SUAUD Nicolas

Email : [suaud@irsamc.ups-tlse.fr](mailto:suaud@irsamc.ups-tlse.fr)

Téléphone : 05 61 55 65 48

### SECRÉTAIRE PÉDAGOGIQUE

UTZEL Sabine

Email : [sabine.utzel@univ-tlse3.fr](mailto:sabine.utzel@univ-tlse3.fr)

## CONTACTS MENTION

### RESPONSABLE DE MENTION CHIMIE

AMIENS Catherine

Email : [amiens@lcc-toulouse.fr](mailto:amiens@lcc-toulouse.fr)

Téléphone : 0561333182

GILARD POTEAU Veronique

Email : [gilard@chimie.ups-tlse.fr](mailto:gilard@chimie.ups-tlse.fr)

Téléphone : 0561558281

## CONTACTS DÉPARTEMENT: FSI.CHIMIE

### DIRECTEUR DU DÉPARTEMENT

CAUSSERAND-ALEXANDROVITCH Christel

Email : [caussera@chimie.ups-tlse.fr](mailto:caussera@chimie.ups-tlse.fr)

Téléphone : 05 61 55 86 90

### SECRETARIAT DU DÉPARTEMENT

DUFOUR Nathalie

Email : [nathalie.dufour1@univ-tlse3.fr](mailto:nathalie.dufour1@univ-tlse3.fr)

Téléphone : 0561558591

Université Paul Sabatier

3R1 - Rdc - Porte 51

118 route de Narbonne

31062 TOULOUSE cedex 9

# TABLEAU SYNTHÉTIQUE DES UE DE LA FORMATION

page	Code	Intitulé UE	ECTS	Obligatoire Facultatif	Cours	TD	TP	Projet	Stage	Stage ne
<b>Premier semestre</b>										
10	EMCHT1AM	PROFESSIONNALISATION	3	O	18	8	4			
11	EMCHT1BM	CARACTÉRISATIONS	6	O	28	32	4			
20	EMCHT1MM	CHIMIE THEORIQUE	3	O						
21	EMCHM1M1	Mathematical fundation of Quantum Mechanics				1				
	EMCHM1M2	Theoretical Chemistry Methods I				1				
<b>Choisir 2 UE parmi les 5 UE suivantes :</b>										
12	EMCHT1DM	OUTILS ET STRATÉGIES DE SYNTHÈSE	3	O	20	20				
13	EMCHT1EM	SOLVANTS ET MODES D'ACTIVATION ALTERNATIFS	3	O	10	20				
14	EMCHT1FM	DE L'ANALYSE DES DONNÉES AUX ÉTUDES CLINIQUES	3	O	12	10	8			
15	EMCHT1GM	CHIMIE BIOORGANIQUE	3	O	10	20				
18	EMCHT1KM	THERMODYNAMIQUE STATISTIQUE II (Bordeaux)	3	O		30				
23	EMCHT1OM	PROJET INFORMATIQUE	3	O				25		
16	EMCHT1IM	INTERACTION RAYONNEMENT MATIÈRE (PAU)	3	O		30				
17	EMCHT1JM	THERMODYNAMIQUE STATISTIQUE I (BORDEAUX)	3	O		30				
24	EMCHT1TM	STAGE FACULTATIF	3	F						0,5
22	EMCHT1NM	MATÉRIAUX À PROPRIÉTÉS ÉLECTRONIQUES REMARQUABLES	3	O		30				
19	EMCHT1LM	TUTORAT	0	F		30				
<b>Second semestre</b>										
25	EMCHT2BM	PROJET	9	O						
	EMCHV2B3	Projet modélisation						50		
26	EMCHT2DM	STAGE	6	O					1	
<b>Choisir 2 UE parmi les 3 UE suivantes :</b>										
27	EMCHT2FM	MÉTAUX DE TRANSITION POUR LA CHIMIE VERTE	3	O	10	20				
28	EMCHT2GM	MODÉLISATION DES MACROMOLÉCULES DU VIVANT	3	O	20	5	5			

page	Code	Intitulé UE	ECTS	Obligatoire Facultatif	Cours	TD	TP	Projet	Stage	Stage ne
30	EMCHT2IM	PROPRIÉTÉS STRUCTURALES ET ÉLECTRONIQUES DE LA MATIÈRE (PAU)	3	O		30				
29	EMCHT2HM	SPECTROSCOPIE THÉORIQUE (Montpellier)	3	O		30				
<b>Choisir 1 UE parmi les 4 UE suivantes :</b>										
33	EMCHT2VM	ANGLAIS	3	O		24				
34	EMCHT2WM	ALLEMAND	3	O		24				
35	EMCHT2XM	ESPAGNOL	3	O		24				
36	EMCHT2YM	FRANÇAIS GRANDS DÉBUTANTS	3	O		24				
31	EMCHT2KM	INITIATION JURIDIQUE	3	F		24				
32	EMCHT2LM	PROJET CHIMIE THEORIQUE	3	O				25		



---

## LISTE DES UE

---

<b>UE</b>	<b>PROFESSIONNALISATION</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>EMCHT1AM</b>	Cours : 18h , TD : 8h , TP : 4h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

AMIENS Catherine

Email : [amiens@lcc-toulouse.fr](mailto:amiens@lcc-toulouse.fr)

Téléphone : 0561333182

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

L'objectif est de préparer l'étudiant à son insertion professionnelle en lui apportant une connaissance du milieu socio-économique régional dans le domaine de la chimie et des attendus des entreprises et les outils de gestion et de communication adaptés.

Compétences visées :

- gérer un projet
- communiquer

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Les principaux outils d'aide à l'insertion professionnelle seront développés : présentation et utilisation du portefeuille d'expérience et de compétences(PEC), des bases de données « entreprises » du SCUIO, des outils disponibles via la plateforme pôle emploi, des règles de base de rédaction d'un curriculum vitae et d'une lettre de motivation. Ces acquis seront réinvestis directement lors d'un bilan de compétences en entrée de master (remplissage PEC), des bilans réguliers de compétences acquises lors des principales UE à caractère expérimental de l'année de Master 1 (fiches PEC spécifiques) et lors de la recherche de stage de fin d'année de Master 1.

Des conférences ou ateliers assurés par des professionnels du secteur viendront compléter les informations disponibles via la base de données du SCUIO, permettront un échange direct entre les étudiants et les professionnels, et apporteront aux étudiants une meilleure connaissance de l'entreprise.

Finalement en préparation de l'UE projet de second semestre, première étape vers la professionnalisation, les principaux outils de gestion/conduite de projet qui seront à mettre en œuvre lors de cette UE, seront présentés.

### PRÉ-REQUIS

Avoir réfléchi à son projet professionnel

### MOTS-CLÉS

Bilan de compétences, Communication, Gestion de projet, Insertion professionnelle

<b>UE</b>	<b>CARACTÉRISATIONS</b>	<b>6 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>EMCHT1BM</b>	Cours : 28h , TD : 32h , TP : 4h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

GILARD POTEAU Veronique

Email : [gilard@chimie.ups-tlse.fr](mailto:gilard@chimie.ups-tlse.fr)

Téléphone : 0561558281

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

L'enseignement dispensé dans cette unité a pour objectif de former les étudiants aux principales méthodes spectroscopiques ainsi qu'aux bases des méthodes de diffraction des rayons X. L'ensemble de ces techniques constitue un outil puissant de détermination structurale.

Compétences visées :

- Analyser et interpréter des spectres de RMN mono- et bi-dimensionnelles de petites molécules.
- Déterminer la structure d'une molécule à l'aide d'un ensemble de méthodes spectroscopiques
- Interpréter un spectre de masse et en faire ressortir des informations structurales
- Retrouver les éléments de symétrie et la maille élémentaire dans un motif périodique 3D.
- Localiser un atome lourd à l'aide des pics de Patterson et l'information sur un groupe d'espace.

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Cette UE permettra à l'étudiant

- D'approfondir la spectroscopie RMN (T1, T2, effet NOE) : application à des problèmes de stéréochimie statique et dynamique, utilisation les principales méthodes de RMN bidimensionnelle (COSY, TOCSY, J-résolu, HMQC, HSQC, HMBC, NOESY, ROESY, DOSY).
- D'aborder, en spectrométrie de masse, les méthodes d'ionisation récentes (ESI, APCI, MALDI...), la haute résolution et les modes de fonctionnement (MS/MS ascendant, descendant,...), mettant ainsi en évidence l'apport de ces méthodes pour l'identification structurale.
- D'appréhender l'intérêt de la complémentarité des méthodes spectroscopiques les plus courantes (UV, IR, RMN, Masse) via leur application à des problèmes de détermination structurale.
- D'acquérir les bases des méthodes de diffraction des rayons X sur monocristaux appliquées à la détermination de la structure des molécules organiques et métalorganiques. La symétrie cristalline, les groupes d'espace, le facteur de diffusion, le facteur de structure, la densité électronique dans le cristal, le problème de la phase, la fonction de Patterson en présence d'un atome lourd et les différentes étapes de la solution au model final seront traités.

### PRÉ-REQUIS

Analyser les spectres RMN 1H et 13C de petites molécules

Interpréter un spectre de masse simple ; connaître les mécanismes de fragmentations simples en IE.

### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Identification spectrométrique de composés organiques, Auteurs : Silverstein , Webster , Kiemle. Ed : De Boeck  
 Spectrométrie de masse .Auteurs : De Hoffmann, Stroobant. Ed : Dunod

### MOTS-CLÉS

Détermination de structures, RMN, spectrométrie de Masse, Diffraction X

<b>UE</b>	<b>OUTILS ET STRATÉGIES DE SYNTHÈSE</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>EMCHT1DM</b>	Cours : 20h , TD : 20h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

MARTIN VACA Blanca Maria  
 Email : [bmv@chimie.ups-tlse.fr](mailto:bmv@chimie.ups-tlse.fr)

Téléphone : 05 61 55 77 37

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Apprendre des transformations complémentaires à celles déjà vues en licence et permettant la création de liaisons C-C et C=C de manière chimio- et régiosélective, en mettant en place une stratégie visant à l'économie d'atomes et d'étapes et en minimisant l'impact environnemental de la transformation.

Compétences visées :

- Savoir choisir l'outil pour réaliser une transformation chimique (*création C-C et C=C en particulier*) selon les règles de la chimie verte.
- Concevoir et mettre en œuvre des synthèses dans un contexte de développement durable en utilisant les principes de la chimie verte
- Identifier et analyser les enjeux de développement durable liés à l'élaboration d'un produit chimique en utilisant les principes de la chimie verte

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

- **Réactions péricycliques** (théorie des orbitales frontières, règles de Woodward-Hoffmann, applications aux principales réactions péricycliques - cycloadditions, réactions chélotropiques, réactions électrocycliques, transpositions sigmatropiques ...)
- **Chimie radicalaire** (applications aux réactions de cyclisation, règles de Baldwin, alternatives à l'étain)
- **Réactions assistées par les métaux** :
  - Métaux groupes 1,2, 11,12 : Méthodes de préparation d'organométalliques et applications pour la formation chimio- et régio-sélective de C-C
  - Métaux de transition : Présentation des transformations catalytiques de formation C-C et C=C (couplage CC et métathèse d'oléfines)
- **Création de liaisons C-C avec des énolates** : outils de contrôle de la chimio-, régio- et stéréosélectivité (contrôle cinétique vs thermodynamique, modèles - Ireland, Zimmermann-Traxler ...)
- **Chimie sans groupement protecteur**
- **Principaux ligands carbonés en chimie organométallique**
- **Réactions élémentaires en chimie organométallique** : Addition oxydante, élimination réductrice, insertion migratoire, bêta-élimination ..

### PRÉ-REQUIS

Chimie organique niveau Licence. Introduction à la chimie organométallique (ligands et décompte d'électrons sur un complexe de métal de transition)

### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Chimie Organométallique, D. Astruc, Ed. EDP Sciences; Chimie Organique, J. Clayden et S Warren, Ed. De Boeck; Chimie Organique avancée, F. A. Carey et R. J. Sundberg, Ed. De Boeck Supérieur.

### MOTS-CLÉS

création C-C/C=C, économie d'atomes et d'étapes, transformation sélective, catalyse organométallique, réactions péricycliques, chimie radicalaire, énolates

<b>UE</b>	<b>SOLVANTS ET MODES D'ACTIVATION ALTERNATIFS</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>EMCHT1EM</b>	Cours : 10h , TD : 20h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

GOMEZ SIMON Montserrat

Email : [gomez@chimie.ups-tlse.fr](mailto:gomez@chimie.ups-tlse.fr)

Téléphone : 0561557738

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Connaître et comprendre les principales propriétés des solvants, ainsi que leurs effets sur la réactivité chimique, notamment l'impact sur la vitesse et la sélectivité des réactions. Connaître les modes d'activation appliqués en synthèse. Appliquer des conditions respectueuses de l'environnement en Chimie Fine.

Compétences visées :

- Identifier et analyser les enjeux de développement durable liés à l'élaboration d'un produit chimique en utilisant les principes de la Chimie Verte
- Concevoir et mettre en œuvre des synthèses dans un contexte de développement durable en utilisant les principes de la chimie verte
- Identifier les conditions optimales de solvant / méthode d'activation les plus adaptés à une transformation chimique

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

#### 1. Introduction

- Nature et propriétés des solvants
- Modes d'activation alternatifs : technologies innovantes pour la chimie durable
- Systèmes de solvants commutables. Solvants alternatifs en Chimie Analytique

#### 2. Chimie sans solvant

- Synthèse de matériaux et composés organiques. Transformations de la biomasse

#### 3. Synthèse de molécules d'intérêt par voie de procédures respectueuse de l'environnement

- Réactions en milieux alternatifs : eau, liquides ioniques, solvants supercritiques, solvants provenant de la biomasse, autres (*Deep Eutectic Solvents*, solvants fluorés)
- Méthodes alternatives : processus photochimiques, activation par micro-ondes, mécano- et sono-chimie, processus sous pression, processus en flux continu

Des méthodologies comportant plusieurs aspects (solvants éco-compatibles couplés aux méthodes d'activation alternatives) seront traités de façon transversale, ainsi que les processus catalytiques.

### PRÉ-REQUIS

Chimie Organique niveau Licence. Connaissances basiques de Chimie Organométallique.

### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

*Eco-friendly synthesis of fine chemicals*, Ed. R. Ballini, RSC Publishing, 2009. =11pt  
*Alternative solvents for green chemistry*, 2nd Ed., F. M. Keton and R. Marriott, RSC Publishing, 2013.

### MOTS-CLÉS

solvants éco-compatibles, biomasse, modes d'activation, micro-ondes, ultrasons, mécano-chimie, sonochimie, photochimie, applications industrielles

<b>UE</b>	<b>DE L'ANALYSE DES DONNÉES AUX ÉTUDES CLINIQUES</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>EMCHT1FM</b>	Cours : 12h , TD : 10h , TP : 8h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

MARTY Jean-Daniel

Email : [marty@chimie.ups-tlse.fr](mailto:marty@chimie.ups-tlse.fr)

Téléphone : 0561556135

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Les connaissances et compétences nécessaires aux traitements de données biologiques ou issues d'expériences analytiques une fois acquises seront mises à profit à travers différents exemples concrets pour l'optimisation de conditions d'analyse, la comparaison d'échantillons, l'analyse d'image, la validation de modèle.... Cette méthodologie sera plus particulièrement utilisée dans le cadre des différentes étapes réglementaires conduisant à la mise sur le marché d'un principe actif (essais cliniques...).

Compétences visées :

- Analyser de façon critique des données numériques en s'inscrivant dans une démarche qualité.
- Développer une méthodologie afin d'assurer un suivi qualité d'un processus de mesure.
- Comprendre le processus de découverte d'un médicament et les étapes de sa mise sur le marché.

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

#### **1.Introduction à l'analyse de données biologiques (biométrie) ou issues d'expériences analytiques**

- Problématique de l'échantillonnage pour l'analyse de données,
- Intervalles de confiances, cartes de contrôle
- Tests statistiques (détections de valeurs aberrantes, conformité d'un échantillon, comparaison d'échantillons,...).

Application à la validation de modèles.

- Analyse multivariée (planification d'expérience, analyse en composante principale...)

#### **2.Application de la biométrie au criblage de données ou à l'analyse d'image**

- Identification de cibles thérapeutiques : biopuces (principe, mise en œuvre et traitement des données)
- Traitement d'images/de données issues de l'analyse par IRM (Imagerie par résonance magnétique) ou TEP (tomographie à Emission de Positron,...)
- Nez artificiels,...

#### **3.De la découverte d'un principe actif à sa mise sur le marché**

- Introduction : cycle de vie d'un médicament et tests cliniques
- Analyse statistiques d'essais cliniques pour un médicament ou un composé dermo-cosmétique
- Etude bibliographique de cas de validation (homéopathie, composés Monsanto, ....)
- Intervention d'industriels

### PRÉ-REQUIS

Notions de base de chimie analytique, notions de qualité, normes et brevets

### MOTS-CLÉS

biométrie, plan d'expérience, tests statistiques, analyse de données, essais cliniques, analyse d'images, validation de modèles

<b>UE</b>	<b>CHIMIE BIOORGANIQUE</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>EMCHT1GM</b>	Cours : 10h , TD : 20h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

ROUX Clément

Email : [c.roux@chimie.ups-tlse.fr](mailto:c.roux@chimie.ups-tlse.fr)

Téléphone : 05 61 55 61 43

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Les objectifs de l'UE Chimie Bioorganique sont de faire découvrir la richesse des mécanismes chimiques développés par la nature et les diverses applications de ces connaissances, depuis la conception rationnelle d'inhibiteurs jusqu'à la chimie fine effectuée par des enzymes. Par ailleurs, cette UE sera l'occasion de présenter les réactions de la chimie organique moderne qui sont inspirées de mécanismes enzymatiques.

Compétences visées :

- Décrypter les mécanismes des transformations enzymatiques afin de concevoir une stratégie d'inhibition rationnelle.
- Concevoir des stratégies de synthèse organique intégrant l'utilisation d'enzymes (bioconversions).
- Comprendre les mécanismes des réactions enzymatiques et être en mesure de s'en inspirer lors de l'élaboration d'un schéma de synthèse organique.

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

- Notion de biochimie métabolique générale : anabolisme/catabolisme
- Mécanismes en catalyse enzymatique
- Enzymologie et stratégies d'inhibition
- Bioconversion : Utilisation d'enzymes en chimie organique
- Chimie bioinspirée ou biomimétique

### PRÉ-REQUIS

Chimie Organique et Structure des Biomolécules, niveau L3.

### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Chimie organique des processus biologiques, McMurry and Begley, Editions DeBoeck, ISBN : 2-8041-5021-6

### MOTS-CLÉS

Biosynthèse et notions de métabolisme, Mécanismes enzymatiques et modèles cinétiques d'inhibition, Chimie biomimétique/bioinspirée, Organocatalyse.

<b>UE</b>	<b>INTERACTION RAYONNEMENT MATIÈRE (PAU)</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>EMCHT1IM</b>	TD : 30h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

LEININGER Thierry

Email : [Thierry.Leininger@irsamc.ups-tlse.fr](mailto:Thierry.Leininger@irsamc.ups-tlse.fr)

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Unifier l'ensemble des connaissances acquises en matière de spectroscopie au niveau licence et les compléter dans le cadre plus général de l'étude de l'interaction matière - rayonnement.

Donner une vision et une compréhension unitaire des différentes techniques d'analyses des matériaux basées sur l'interaction matière - rayonnement.

Compétences visées :

- comprendre les fondements des méthodes spectroscopiques ;
- choisir la(les) méthode(s) spectroscopique(s) la(les) plus adaptée(s) à l'étude d'une propriété/d'un matériau selon le contexte.

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

#### *I. Introduction*

#### *II. Interaction photons/matière*

1. Réfraction et réflexion. 2. Absorption et émission. 3. Fluorescence X.
4. Probabilité d'interaction photon-matière et coefficient d'atténuation. 5. Diffusion élastique (Rayleigh-Thomson) et inélastique (Compton). 6. Diffraction des rayons X et application à la détermination des structures cristallines

#### *III. Interaction électrons/matière*

#### *IV. Interaction neutrons/matière*

1. Diffusion élastique et inélastique des neutrons. 2. Diffraction des neutrons.

#### *V. Interaction particules chargées/matière*

1. Collision et freinage. 2. Longueur de trajectoire et parcours. 3. Diffusion élastique et inélastique des électrons.
4. Electrons primaires rétrodiffusés. 5. Electrons secondaires. 6. Electrons Auger.
7. Diffraction des électrons et techniques apparentées.

#### *VI. Défauts induits par irradiation*

1. Défauts créés par chocs atomiques. 2. Défauts créés par chocs électroniques.

#### *VII. Modifications des propriétés physiques des matériaux par irradiation*

1. Métaux et alliages. 2. Matériaux semi-conducteurs. 3. Irradiation des solides ioniques et des isolants.

### MOTS-CLÉS

Interaction photons/matière ; Interaction électrons/matière ; Interaction neutrons/matière ; Interaction particules chargées/matière ; Défauts



<b>UE</b>	<b>THERMODYNAMIQUE STATISTIQUE I (BOR-DEAUX)</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>EMCHT1JM</b>	TD : 30h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

LEININGER Thierry

Email : [Thierry.Leininger@irsamc.ups-tlse.fr](mailto:Thierry.Leininger@irsamc.ups-tlse.fr)

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Les objectifs du cours sont d'expliquer le comportement macroscopique des systèmes par leur description microscopique et de présenter les caractéristiques universelles dans l'étude des systèmes thermodynamiques.

#### **Compétences disciplinaires principales :**

- Mobiliser les concepts et technologies adéquats pour gérer et résoudre des problèmes dans les différents domaines de la chimie, et de la chimie physique.
- Modéliser des phénomènes ou des systèmes chimiques, ou d'interpréter des résultats expérimentaux.
- Valider un modèle par comparaison de ses prévisions aux résultats expérimentaux et apprécier ses limites de validité.
- Développer une argumentation avec esprit critique.

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

#### **Thermodynamique statistique**

I. Rappels de thermodynamique

II. Une approche plus générale de la thermodynamique statistique

III. Généralités sur les systèmes de particules identiques sans interaction

IV. Applications de la statistique de Boltzmann

V. Un exemple d'utilisation d'une autre statistique : le rayonnement du corps noir.

### PRÉ-REQUIS

Base de la thermodynamique niveau licence de Chimie, licence de Physique Chimie.

### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- Claude Coulon, Physique statistique et thermodynamique, Dunod
- Atkins et De Paula, Physical Chemistry, Oxford
- Diu, Guthmann, Lederer and Roulet, Physique Statistique, Hermann

<b>UE</b>	<b>THERMODYNAMIQUE STATISTIQUE II (Bordeaux)</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>EMCHT1KM</b>	TD : 30h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

LEININGER Thierry

Email : [Thierry.Leininger@irsamc.ups-tlse.fr](mailto:Thierry.Leininger@irsamc.ups-tlse.fr)

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Les objectifs de ce cours sont de fournir aux étudiants les connaissances nécessaires à la compréhension du phénomène de transition de phase. Il vient compléter le module Thermodynamique Statistique 1.

#### **Compétences disciplinaires principales :**

- Mobiliser les concepts et technologies adéquats pour gérer et résoudre des problèmes dans les différents domaines de la chimie, et de la chimie physique.
- Modéliser des phénomènes ou des systèmes chimiques, ou d'interpréter des résultats expérimentaux.
- Valider un modèle par comparaison de ses prévisions aux résultats expérimentaux et apprécier ses limites de validité.
- Développer une argumentation avec esprit critique.

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Van der Waals fluids

Paramagnetic-Ferromagnetic transition

Introduction to Landau theory

### PRÉ-REQUIS

Base de la thermodynamique niveau licence de Chimie, licence de Physique Chimie. Module Thermodynamique Statistique 1

### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- Claude Coulon, Physique statistique et thermodynamique, Dunod
- Atkins et De Paula, Physical Chemistry, Oxford
- Diu, Guthmann, Lederer and Roulet, Physique Statistique, Hermann

### MOTS-CLÉS

Physique statistique. Transition de phase.

<b>UE</b>	<b>TUTORAT</b>	<b>0 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>EMCHT1LM</b>	TD : 30h		

<b>UE</b>	<b>CHIMIE THEORIQUE</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>Sous UE</b>	Mathematical fundation of Quantum Mechanics		
<b>EMCHM1M1</b>	TD : 1h		

<b>UE</b>	<b>CHIMIE THEORIQUE</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>Sous UE</b>	Theoretical Chemistry Methods I		
<b>EMCHM1M2</b>	TD : 1h		

UE	MATÉRIAUX À PROPRIÉTÉS ÉLECTRONIQUES REMARQUABLES	3 ECTS	1 <sup>er</sup> semestre
EMCHT1NM	TD : 30h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

GUIHERY Nathalie

Email : [nathalie.guihery@irsamc.ups-tlse.fr](mailto:nathalie.guihery@irsamc.ups-tlse.fr)

Téléphone : 0561556098

LEININGER Thierry

Email : [Thierry.Leininger@irsamc.ups-tlse.fr](mailto:Thierry.Leininger@irsamc.ups-tlse.fr)

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Cet enseignement fournit les bases théoriques d'analyse de l'origine microscopique de propriétés physico-chimiques insolites.

Il s'adresse aussi bien aux théoriciens qu'aux étudiants qui se destinent à la chimie expérimentale.

Compétences visées :

- comprendre les fondements physiques à l'origine des propriétés électroniques remarquables
- établir un hamiltonien modèle adapté à un système physico-chimique, le résoudre et interpréter les solutions

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Sont abordées des propriétés cruciales par l'intensité des recherches qu'elles suscitent et leurs applications technologiques : transfert électronique, magnétisme, photomagnétisme, bistabilité, conduction, etc. Plusieurs types de composés seront étudiés : interrupteurs moléculaires, molécules aromatiques mono et multi-radicalaires et stratégie d'assemblage de structures organiques ordonnées à haut spin, composés à transition de spin, molécules aimants, complexes poly-métalliques couplés ferro-, antiferro- ou ferrimagnétiquement.

1. Dérivation de modèles simples pour les systèmes fortement corrélés (Heisenberg).
2. Composés hydrocarbonés : aromaticité et propriétés magnétiques de systèmes cycliques et polycycliques polyradicalaires.
3. Complexes monométalliques : composés à transition de spin (théories du champ cristallin et du champ de ligand, concept de bistabilité). Composés anisotropes magnétiquement (couplage spin orbite), vers les aimants moléculaires (hystérèse)...
4. Complexes bimétalliques : transfert électronique (interrupteur moléculaires) dans les composés à valence mixte et échange de spin dans les composés magnétiques (couplages ferro- et antiferromagnétique), photomagnétisme.

### PRÉ-REQUIS

Théorie LCAO, Hückel

### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Atkins et De Paula, Physical Chemistry, Oxford

### MOTS-CLÉS

Magnétisme moléculaire - Transfert électronique - Hamiltonien modèle

<b>UE</b>	<b>PROJET INFORMATIQUE</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>EMCHT10M</b>	Projet : 25h		

## ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

LEININGER Thierry

Email : [Thierry.Leininger@irsamc.ups-tlse.fr](mailto:Thierry.Leininger@irsamc.ups-tlse.fr)

## OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

L'objectif de cette UE est de cultiver la double compétence informatique/chimie théorique des étudiants du parcours par le biais de la résolution de problèmes de physico-chimie à l'aide d'outils numériques tels la programmation ou l'utilisation d'un logiciel d'algèbre formelle. Pour cela, ils feront l'apprentissage du langage de programmation Fortran au travers de petits exemples et seront également initiés à wxMaxima, logiciel libre de calcul formel.

Compétence visée :

- Ecrire et/ou utiliser de façon autonome un logiciel permettant de résoudre un problème physico-chimique

## DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

L'UE donnera lieu à 2 types de projets relevant de

- la programmation appliquée à la résolution d'un problème de chimie théorique : modélisation moléculaire, méthode de Hückel, mécanique moléculaire, symétrie moléculaire,...
- l'utilisation d'un outil de calcul formel pour la résolution de problèmes physico-chimiques : fonctions propres de l'atome d'hydrogène, oscillateur harmonique, particule dans un puits, symétrie moléculaire, cinétique chimique, dynamique moléculaire, oscillateur harmonique, RMN et couplage de moments magnétiques ...

Pour mener à bien leurs projets, les étudiants pourront s'appuyer sur des cours en ligne. Ils y trouveront notamment

### Programmation

- Notions de base de l'architecture et du système d'exploitation d'une machine Linux
- Structure de base d'un programme Fortran et principales instructions

### Calcul formel

- Prise en main du logiciel wxMaxima

## PRÉ-REQUIS

Culture générale en physico-chimie (symétrie moléculaire, thermodynamique et cinétique chimiques, spectroscopies, chimie théorique et méthode de Hückel,...)

## RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

**Fortran 90 documentation** : <http://www.fortran90.org/#{}>

[https://fr.wikipedia.org/wiki/Système\\_de\\_calcul\\_formel](https://fr.wikipedia.org/wiki/Système_de_calcul_formel)

<http://maxima.sourceforge.net/docs/maximabook/maximabook-19-Sept-2004.pdf>

## MOTS-CLÉS

Programmation - Algèbre formelle - Langage Fortran - Chimie théorique

<b>UE</b>	<b>STAGE FACULTATIF</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>EMCHT1TM</b>	Stage ne : 0,5h		



<b>UE</b>	<b>PROJET</b>	<b>9 ECTS</b>	<b>2<sup>nd</sup> semestre</b>
<b>Sous UE</b>	Projet modélisation		
<b>EMCHV2B3</b>	Projet : 50h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

GUIHERY Nathalie

Email : [nathalie.guihery@irsamc.ups-tlse.fr](mailto:nathalie.guihery@irsamc.ups-tlse.fr)

Téléphone : 0561556098

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Ce module va permettre d'être confronté à une problématique expérimentale et d'évaluer quelle peut être la contribution de la modélisation à la rationalisation des données et à la compréhension des phénomènes. Les étudiants travailleront de façon très autonome par groupe de 2 à 3 tout au long du semestre autour d'un sujet de recherche pré-défini.

Compétences visées :

- s'organiser dans un groupe
- préparer en amont un programme d'expériences numériques
- confronter les résultats théoriques avec ceux issus de l'expérience et présenter les résultats (rapport et oral).
- donner du sens aux résultats numériques
- comparer avec soin résultats expérimentaux et théoriques

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Travaux de modélisation par un logiciel de chimie quantique : analyse structurale, propriétés spectroscopiques, grandeurs thermodynamiques et cinétiques, rationalisation par l'analyse de la structure électronique.

### PRÉ-REQUIS

Module de modélisation moléculaire du tronc commun

### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Andrew Leach, Molecular modelling : principles and applications, Prentice-Hall, 2001.

Ian Fleming, Frontier Orbitals and Organic Chemical Reactions, Wiley, 2006.

### MOTS-CLÉS

Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) ; Chimie computationnelle

<b>UE</b>	<b>STAGE</b>	<b>6 ECTS</b>	<b>2<sup>nd</sup> semestre</b>
<b>EMCHT2DM</b>	Stage : 1 mois minimum		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

CIUCULESCU-PRADINES Diana

Email : [ciuculescu-pradines@chimie.ups-tlse.fr](mailto:ciuculescu-pradines@chimie.ups-tlse.fr)

GOUYGOU Maryse

Email : [gouygou@lcc-toulouse.fr](mailto:gouygou@lcc-toulouse.fr)

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Ce stage est destiné à mettre l'étudiant dans une situation préprofessionnelle, dans un laboratoire de recherche académique ou un laboratoire de recherche et développement industriel, en France ou à l'étranger, pendant une durée minimum de huit semaines.

Compétences visées :

- Gérer un projet et le conduire
- S'intégrer dans une équipe
- S'organiser individuellement et travailler en équipe
- Mobiliser ses connaissances théoriques et pratiques pour résoudre un problème
- Communiquer ses résultats scientifiques en anglais sous forme d'une affiche et d'une présentation orale

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Le stage permettra à l'étudiant :

- de découvrir le monde du travail industriel ou universitaire.
- de mettre en pratique, dans le contexte quotidien du laboratoire, ses acquis théoriques et expérimentaux.
- d'acquérir de nouvelles connaissances.
- de faire preuve d'autonomie et d'initiative face à un problème à traiter seul ou en équipe.
- de s'initier à la conception des supports de communication pour la présentation de ses résultats scientifiques.

### PRÉ-REQUIS

Acquis théoriques et expérimentaux du niveau M1

### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

[www.univ-tlse3.fr/stages-et-emplois-402611.kjsp?RH=ACCUEIL&RF=1237799694996](http://www.univ-tlse3.fr/stages-et-emplois-402611.kjsp?RH=ACCUEIL&RF=1237799694996)

### MOTS-CLÉS

Stage Universitaire ou Entreprise- France ou Etranger

<b>UE</b>	<b>MÉTAUX DE TRANSITION POUR LA CHIMIE VERTE</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>2<sup>nd</sup> semestre</b>
<b>EMCHT2FM</b>	Cours : 10h , TD : 20h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

SUTRA Pierre

Email : [sutra@lcc-toulouse.fr](mailto:sutra@lcc-toulouse.fr)

Téléphone : LCC : 05 61 33 32 16

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Les objectifs de l'UE visent les compétences suivantes :

- Mobiliser les concepts théoriques de la photochimie des complexes de métaux de transition
- Utiliser les méthodes de synthèses de complexes de métaux de transition photosensibles
- Interpréter les données expérimentales de caractérisation des complexes de métaux de transition photosensibles pour établir les corrélations avec les propriétés physico-chimiques et photophysiques
- Mobiliser les concepts théoriques de la chimie de coordination pour appréhender la relation entre la structure d'un complexe de métal de transition et ses propriétés physicochimiques
- Mobiliser les concepts théoriques de la chimie des métaux de transition et de la relation structure propriété pour concevoir des complexes orientés vers les applications de la chimie verte

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

#### **Photochimie des complexes de métaux de transition**

Diagramme de Perrin-Jablonski

Nature des états excités des complexes de métaux de transition et paramètres photophysiques

Réactivité chimique des états excités des complexes de métaux de transition (échanges de ligands, décomplexation, redox, réactivité des ligands...)

Luminescence

#### **Conception et propriétés de complexes de métaux de transition pour des applications en chimie verte**

Introduction à la catalyse avec/sans étape redox

Réduction du CO<sub>2</sub>

Imagerie médicale

Magnétisme

Réduction du proton

Photocatalyse redox

Complexes de métaux de transition pour l'optoélectronique, application aux OLEDs et aux capteurs

Complexes de métaux de transition pour l'énergie, application au photovoltaïque et à la photodécomposition de l'eau

### PRÉ-REQUIS

chimie de coordination, décompte électronique et spectroscopie d'absorption des complexes de métaux de transition ; théorie des groupes

### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Inorganic chemistry, J.E. Huheey, E.A. Keiter, R.L. Keiter, 4th ed, New York , - BU MG 546 HUH

Les orbitales moléculaires dans les complexes, Y. Jean, Ed. Ecole polytechnique - BU 544.1(079) JEA

### MOTS-CLÉS

Complexes, métaux de transition, états excités, photochimie, relation structure propriété, chimie verte

<b>UE</b>	<b>MODÉLISATION DES MACROMOLÉCULES DU VIVANT</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>2<sup>nd</sup> semestre</b>
<b>EMCHT2GM</b>	Cours : 20h , TD : 5h , TP : 5h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

JOLIBOIS Franck

Email : [franck.jolibois@univ-tlse3.fr](mailto:franck.jolibois@univ-tlse3.fr)

Téléphone : 0561559638

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Ce module d'enseignement a pour but de fournir et d'appréhender les bases théoriques associées à certaines méthodes de modélisation que l'on trouve dans différents domaines en lien avec le vivant et la santé. Ce module se propose de répondre, pour partie, à trois questions : 1) Pourquoi modéliser ? 2) Quoi modéliser ? 3) Comment modéliser ?

Compétences visées :

- Comprendre et appréhender les bases de la modélisation des macromolécules.
- Avoir un regard critique sur les travaux réalisés et publiés dans le domaine.
- Effectuer des modélisations physico-chimiques simples.

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

1) «Pourquoi modéliser ? » : les principaux domaines d'application de la modélisation moléculaire en particulier le lien structure - propriété :

- Intérêt en chimie de synthèse (réactivité,...) et en physico-chimie de la matière molle
- Intérêt en caractérisation structurale (propriétés spectroscopiques, électroniques,...)
- Intérêt en biologie (interactions substrats-macromolécules, organisation, découverte de molécules bioactives par criblage virtuel,...).

2) «Quoi modéliser ? » : une réflexion sur la notion de modèles physico-chimiques :

- Qu'est-ce qu'une macromolécule ?
- Est-il nécessaire de la traiter dans sa globalité ?
- Faut-il utiliser des modèles allant du plus simpliste ou plus compliqué ?

*Un lien sera fait avec la notion de calcul d'énergie (des méthodes de chimie quantique aux approches «gros grains» en passant par toute la hiérarchie de méthodes).*

3) «Comment modéliser ? » : Les approches employées pour déterminer les propriétés :

- «Builders » moléculaires ou exploitation de données cristallographiques
- Optimisation locales et globales
- Exploration de surfaces d'énergie potentielle
- Docking moléculaire
- Analyse Thermo-statistique

### PRÉ-REQUIS

Les notions abordées dans le module de tronc commun «modélisation moléculaire » constituent un bon socle de connaissances.

### MOTS-CLÉS

Modélisation, Chimie et physique théoriques, Chimie quantique, Structure, Docking, Réactivité, Spectrométrie, Protéines, Acides nucléiques, conformation

<b>UE</b>	<b>SPECTROSCOPIE THÉORIQUE (Montpellier)</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>2<sup>nd</sup> semestre</b>
<b>EMCHT2HM</b>	TD : 30h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

LEININGER Thierry

Email : [Thierry.Leininger@irsamc.ups-tlse.fr](mailto:Thierry.Leininger@irsamc.ups-tlse.fr)

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Le but de cette UE est d'approfondir et compléter les connaissances acquises d'un point de vue théorique en spectroscopie par les étudiants lors de leur licence.

Compétences visées :

- rationaliser les spectres électroniques atomiques et moléculaires
- rationaliser les spectres rovibrationnels et RMN moléculaires

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

#### 1. Introduction aux spectroscopies - généralités

a) Interaction Matière-Rayonnement. b) Absorption/Emission(microscopique). c) L'Équilibre Thermique

#### 2. Spectroscopie Atomique

a) Rappels de Mécanique Quantique. b) Le Moment Cinétique. c) Addition de 2 Moments Cinétiques. d) Le Couplage Spin-Orbite. e) Termes Spectroscopiques. f) Règles de Hund. g) Spectres Atomiques

#### 3. Vibration-Rotation des Molécules

a) Molécule Diatomique. b) Vibration des Polyatomiques. c) Rotation des Polyatomiques

#### 4. Spectroscopie Moléculaire Électronique

a) Orbitales Moléculaires-Configurations Électroniques. b) Termes Électroniques. c) Transitions Vibroniques. d) Éléments de Photochimie. e) Spectroscopie Photoélectronique

#### 5. Spectroscopie RMN

a) Hamiltonien effectif de spins. b) Tenseur de blindage, contributions dia- et paramagnétiques. c) Couplage spin-spin. d) Règles de sélection

### PRÉ-REQUIS

Principes de base de la mécanique quantique - Théorie des groupes

### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

C. Leforestier, Introduction à la Chimie Quantique, 2005, Dunod.

J.D. Simon, D. McQuarrie, Chimie Physique - Approche Moléculaire, 2000, Dunod.

### MOTS-CLÉS

Spectroscopie atomique - spectroscopie rovibrationnelle - spectroscopie RMN

<b>UE</b>	<b>PROPRIÉTÉS STRUCTURALES ET ÉLECTRONIQUES DE LA MATIÈRE (PAU)</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>2<sup>nd</sup> semestre</b>
<b>EMCHT2IM</b>	TD : 30h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

LEININGER Thierry

Email : [Thierry.Leininger@irsamc.ups-tlse.fr](mailto:Thierry.Leininger@irsamc.ups-tlse.fr)

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Le but de cette UE est la

- compréhension de la structure électronique des matériaux ;
- compréhension des propriétés électroniques et électriques qui en découlent ;
- compréhension du lien étroit de ces propriétés avec les caractéristiques structurales des matériaux.

Les compétences visées sont de savoir :

- aborder l'étude des propriétés de matériaux par le biais des méthodes de chimie théorique ;
- rationaliser, voire anticiper, les propriétés électroniques et électriques d'un matériau à partir de sa composition et de sa structure.

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

**1**-Théorie quantique du gaz d'électrons libres,

**a.** Conductibilité électrique et loi d'Ohm.

**b.** Applications physiques de la théorie du gaz d'électrons libres.

**2**- Réseau réciproque, Zone de Brillouin.

**3**- Des orbitales moléculaires aux bandes d'énergie.

**4**- Equation de Schrödinger dans un solide cristallin - méthode des « liaisons fortes »

**5**- Fonctions de Bloch, orbitales cristallines, Energie de Fermi

**6**- Théorie des bandes, Surface de Fermi, Distorsions de Peierls

**7**- Semi-conducteurs intrinsèques, Semi-conducteurs extrinsèques, Conductivité, Applications et dispositifs

**8**- Composés amorphes :

**a.** Structure électronique (caractère imposé par le désordre structural, description locale des états électroniques dans un solide sans défaut, seuil de mobilité, origine des états localisés)

**b.** Propriétés de transport des semi-conducteurs amorphes (conductivité par les états étendus, dans les « queues de bandes », par saut au niveau de Fermi, Possibilités de dopage

**9**- Exemples pratiques d'analyse faisant intervenir la structure électronique

### MOTS-CLÉS

structure électronique des matériaux ; caractère structural ; semi-conducteurs, composés amorphes

<b>UE</b>	<b>INITIATION JURIDIQUE</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>2<sup>nd</sup> semestre</b>
<b>EMCHT2KM</b>	TD : 24h		

<b>UE</b>	<b>PROJET CHIMIE THEORIQUE</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>2<sup>nd</sup> semestre</b>
<b>EMCHT2LM</b>	Projet : 25h		

**ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE**

LEININGER Thierry

Email : [Thierry.Leininger@irsamc.ups-tlse.fr](mailto:Thierry.Leininger@irsamc.ups-tlse.fr)



<b>UE</b>	<b>ANGLAIS</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>2<sup>nd</sup> semestre</b>
<b>EMCHT2VM</b>	TD : 24h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

AMIENS Catherine

Email : [amiens@lcc-toulouse.fr](mailto:amiens@lcc-toulouse.fr)

Téléphone : 0561333182

AVRIL Henri

Email : [h-avril@live.com](mailto:h-avril@live.com)

CONNERADE Florent

Email : [florent.connerade@univ-tlse3.fr](mailto:florent.connerade@univ-tlse3.fr)

GILARD POTEAU Veronique

Email : [gilard@chimie.ups-tlse.fr](mailto:gilard@chimie.ups-tlse.fr)

Téléphone : 0561558281

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

#### Niveau C1 du Cadre Européen de Certification en Langues

L'objectif de cette UE est de développer les compétences indispensables aux étudiant/es en vue de leur intégration dans la vie professionnelle.

Il s'agira d'acquérir l'autonomie linguistique nécessaire et de perfectionner les outils de langue spécialisée permettant l'intégration professionnelle et la communication d'une expertise professionnelle dans le contexte international. On mettra en œuvre l'accompagnement en anglais du projet scientifique ou des formalités d'insertion professionnelle. On facilitera ainsi les démarches en anglais inhérentes à la recherche universitaire et au recrutement professionnel (recherche bibliographique, publications, communications et formalités, lettres, entretiens professionnels[u] en anglais, [/u])

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Sur l'ensemble M1-M2, l'enseignement de l'anglais s'appuie sur le programme scientifique et sur le projet individuel de chaque étudiant, dans la recherche universitaire ou dans l'insertion professionnelle, toutes deux de haut niveau. Les étudiants travailleront les compétences liées à la synthèse bibliographique : sélection, décryptage, reformulation, synthèse et/ou short abstract. Ils s'approprient les outils linguistiques de la publication et de la communication scientifiques (compréhension de longues publications ou communications par le biais de la contraction : abstracts minimalistes et style elliptique et non verbal des supports visuels).

Le projet scientifique de l'étudiant sera accompagné d'une aide individuelle.

Les étudiants devront maîtriser les éléments de critique orale et/ou écrite de la validité d'une recherche scientifique à partir d'un ou plusieurs articles sur une thématique choisie par eux-mêmes. Ils s'approprient les structures communicatives et linguistiques spécifiques utilisées dans le cadre d'une simulation d'insertion professionnelle ou de tâche professionnelle.

### PRÉ-REQUIS

Niveau B1 du CECRL.

### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Publications scientifiques fournies par les spécialistes des différents domaines.

Ressources scientifiques en anglais pour élaborer un travail de consolidation du vocabulaire et des structures spécifiques.

### MOTS-CLÉS

Projet Anglais scientifique - Synthèse bibliographique - Abstract - Rédaction - Publication - Communications - Critique scientifique insertion professionnelle

<b>UE</b>	<b>ALLEMAND</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>2<sup>nd</sup> semestre</b>
<b>EMCHT2WM</b>	TD : 24h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

SANTAMARINA Diego

Email : [diego.santamarina@univ-tlse3.fr](mailto:diego.santamarina@univ-tlse3.fr)

Téléphone : 05 61 55 64 27

### PRÉ-REQUIS

Niveau B2 en anglais

<b>UE</b>	<b>ESPAGNOL</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>2<sup>nd</sup> semestre</b>
<b>EMCHT2XM</b>	TD : 24h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

SANTAMARINA Diego

Email : [diego.santamarina@univ-tlse3.fr](mailto:diego.santamarina@univ-tlse3.fr)

Téléphone : 05 61 55 64 27

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Etre capable de travailler en milieu hispanophone ou avec des partenaires hispanophones

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Activités langagières permettant la maîtrise de l'espagnol général et de la langue de spécialité

### PRÉ-REQUIS

Niveau B2 en anglais - Pas de pré-requis particulier en espagnolEspagnol professionnel, le cours prend en compte les différents niveaux

### MOTS-CLÉS

Espagnol professionnel

<b>UE</b>	<b>FRANÇAIS GRANDS DÉBUTANTS</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>2<sup>nd</sup> semestre</b>
<b>EMCHT2YM</b>	TD : 24h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

JASANI Isabelle

Email : [leena.jasani@wanadoo.fr](mailto:leena.jasani@wanadoo.fr)

Téléphone : 65.29

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Cette UE est conseillée aux étudiants ayant un niveau très faible en français

### PRÉ-REQUIS

Niveau B2 en anglais

### MOTS-CLÉS

français scientifique

# GLOSSAIRE

---

## TERMES GÉNÉRAUX

### DÉPARTEMENT

Les départements d'enseignement sont des structures d'animation pédagogique internes aux composantes (ou facultés) qui regroupent les enseignants intervenant dans une ou plusieurs mentions

### UE : UNITÉ D'ENSEIGNEMENT

Unité d'Enseignement. Un semestre est découpé en unités d'enseignement qui peuvent être obligatoire, optionnelle (choix à faire) ou facultative (UE en plus). Une UE représente un ensemble cohérent d'enseignements auquel est associé des ECTS.

### ECTS : EUROPEAN CREDITS TRANSFER SYSTEM

Les ECTS sont destinés à constituer l'unité de mesure commune des formations universitaires de Licence et de Master dans l'espace européen depuis sa création en 1989. Chaque UE obtenue est ainsi affectée d'un certain nombre d'ECTS (en général 30 par semestre d'enseignement). Le nombre d'ECTS est fonction de la charge globale de travail (CM, TD, TP, etc.) y compris le travail personnel. Le système des ECTS vise à faciliter la mobilité et la reconnaissance des diplômes en Europe.

## TERMES ASSOCIÉS AUX DIPLOMES

Les diplômes sont déclinés en domaines, mentions et parcours.

### DOMAINE

Le domaine correspond à un ensemble de formations relevant d'un champ disciplinaire ou professionnel commun. La plupart de nos formations relèvent du domaine Sciences, Technologies, Santé.

### MENTION

La mention correspond à un champ disciplinaire. Elle comprend, en général, plusieurs parcours.

### PARCOURS

Le parcours constitue une spécialisation particulière d'un champ disciplinaire choisie par l'étudiant au cours de son cursus.

## TERMES ASSOCIÉS AUX ENSEIGNEMENTS

### CM : COURS MAGISTRAL(AUX)

Cours dispensé en général devant un grand nombre d'étudiants (par exemple, une promotion entière), dans de grandes salles ou des amphis. Au-delà de l'importance du nombre d'étudiants, ce qui caractérise le cours magistral, est qu'il est le fait d'un enseignant qui en définit lui-même les structures et les modalités. Même si ses contenus font l'objet de concertations entre l'enseignant, l'équipe pédagogique, chaque cours magistral porte la marque de l'enseignant qui le dispense.

## TD : TRAVAUX DIRIGÉS

Ce sont des séances de travail en groupes restreints (de 25 à 40 étudiants selon les composantes), animés par des enseignants. Ils illustrent les cours magistraux et permettent d'approfondir les éléments apportés par ces derniers.

## TP : TRAVAUX PRATIQUES

Méthode d'enseignement permettant de mettre en pratique les connaissances théoriques acquises durant les CM et les TD. Généralement, cette mise en pratique se réalise au travers d'expérimentations. En règle générale, les groupes de TP sont constitués des 16 à 20 étudiants. Certains travaux pratiques peuvent être partiellement encadrés voire pas du tout. A contrario, certains TP, du fait de leur dangerosité, sont très encadrés (jusqu'à 1 enseignant pour quatre étudiants).

## PROJET OU BUREAU D'ÉTUDE

Le projet est une mise en pratique en autonomie ou en semi-autonomie des connaissances acquises. Il permet de vérifier l'acquisition des compétences.

## TERRAIN

Le terrain est une mise en pratique encadrée des connaissances acquises en dehors de l'université.

## STAGE

Le stage est une mise en pratique encadrée des connaissances acquises dans une entreprise ou un laboratoire de recherche. Il fait l'objet d'une législation très précise impliquant, en particulier, la nécessité d'une convention pour chaque stagiaire entre la structure d'accueil et l'université.



