

PÉRIODE D'ACCRÉDITATION : 2016 / 2021

UNIVERSITÉ PAUL SABATIER

---

# SYLLABUS MASTER

## Mention Chimie

### M2 chimie théorique et modélisation

---

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

2020 / 2021

11 JUILLET 2021

# SOMMAIRE

---

PRÉSENTATION . . . . .	3
PRÉSENTATION DE LA MENTION ET DU PARCOURS . . . . .	3
Mention Chimie . . . . .	3
Parcours . . . . .	3
PRÉSENTATION DE L'ANNÉE DE M2 chimie théorique et modélisation . . . . .	3
Liste des formations donnant accès de droit : . . . . .	4
RUBRIQUE CONTACTS . . . . .	5
CONTACTS PARCOURS . . . . .	5
CONTACTS MENTION . . . . .	5
CONTACTS DÉPARTEMENT : FSI.Chimie . . . . .	5
Tableau Synthétique des UE de la formation . . . . .	6
LISTE DES UE . . . . .	7
GLOSSAIRE . . . . .	17
TERMES GÉNÉRAUX . . . . .	17
TERMES ASSOCIÉS AUX DIPLOMES . . . . .	17
TERMES ASSOCIÉS AUX ENSEIGNEMENTS . . . . .	17

# 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

Le but du parcours Chimie Théorique et Modélisation est de donner aux étudiants une formation rigoureuse en chimie théorique et computationnelle en vue d'intégrer le monde académique ou bien les équipes de R&D de grands groupes industriels. Elle offre une double compétence informatique/chimie théorique au travers de l'apprentissage d'un langage de programmation et d'outils d'algèbre formelle.

Ce parcours propose un enseignement des méthodes de base de la chimie théorique avec une ouverture sur plusieurs thématiques notamment au travers de la mutualisation dans le cadre du Réseau Français de Chimie Théorique (RFCT) avec des intervenants des différents centres universitaires du Pôle Sud-Ouest (Bordeaux, Montpellier, Pau et Toulouse).

## PRÉSENTATION DE L'ANNÉE DE M2 CHIMIE THÉORIQUE ET MODÉLISATION

La chimie théorique et la modélisation moléculaire jouent un rôle de plus en plus important en chimie, biochimie, physique et en sciences des matériaux. Cette discipline de la chimie fournit outils conceptuels, modèles qualitatifs et données quantitatives qui permet aux chimistes théoriciens de contribuer au développement de systèmes moléculaires innovants et sur-mesure.

Le prix Nobel de chimie est régulièrement attribué à des chimistes théoriciens, confirmant ainsi le rôle déterminant de la chimie théorique. On peut juger ci-dessous de l'évolution de la chimie théorique, gouvernée par des développements méthodologiques, mais aussi par l'accroissement phénoménal de la puissance des ordinateurs (citation extraites des communiqués de presse du comité Nobel) :

- The Nobel Prize in Chemistry 1981 was awarded jointly to Kenichi Fukui and Roald Hoffmann « *for their theories, developed independently, concerning the course of chemical reactions* » ; « **Good theoretical models provide guidance for experimental researchers and save them time. Fukui's and Hoffmann's theories are milestones in the development of our understanding of the course of chemical reactions. This development has, however, by no means been brought to a halt by the prizewinning work. This work has provided inspiration for new lines of development. »**

- The Nobel Prize in Chemistry 1998 was divided equally between Walter Kohn "*for his development of the density-functional theory*" and John A. Pople "*for his development of computational methods in quantum chemistry*"; « **Quantum chemistry is today used within all branches of chemistry and molecular physics affords deeper understanding of molecular processes that cannot be obtained from experiments alone** »
- The Nobel Prize in Chemistry 2013 was awarded jointly to Martin Karplus, Michael Levitt and Arieh Warshel "*for the development of multiscale models for complex chemical systems*"; « **Today the computer is just as important a tool for chemists as the test tube. Simulations are so realistic that they predict the outcome of traditional experiments.** »

**Quelques débouchés potentiels** :Le maintien d'une spécialité dédiée permet en particulier d'intégrer à la formation l'apprentissage des outils informatiques nécessaires au chimiste théoricien, ce qui donne aussi une double compétence, qui peut spécifiquement être valorisée sur le marché de l'emploi.

- Doctorant
- Cadre technique d'études scientifiques et de recherche fondamentale
- Cadre technique d'études-recherche-développement de l'industrie
- Enseignant -hercheur
- Consultant
- Ingénieur-concepteur en recherche
- Ingénieur technico-commercial et sociétés de service ou de commercialisation de logiciels à caractère scientifique
- Ingénieur consultant en informatique
- Chef d'entreprise (start-up)

**Enseignement à distance dispensé par les universités partenaires** :Un site internet a été mis en place pour permettre une meilleure coordination entre les différentes universités partenaires (<http://rfctso-ctm.blogspot.fr/>). Il donne accès :

- à la liste des étudiants du réseau (M2R)
- à l'emploi du temps
- à une chaîne YouTube sur laquelle sont déposés les screencasts des cours, pour suivi en différé (ce qui résout les problèmes d'incompatibilité d'emplois du temps entre les différents sites)
- aux documents de cours téléchargeables
- à une salle d'enseignement virtuelle, pour le suivi des cours à distance et en direct

Sur chaque centre, un enseignant référent est là pour ne pas laisser les étudiants en totale autonomie par rapport à ces outils. Il convient en effet de s'assurer qu'ils suivent de façon régulière les enseignements, sans se laisser dépasser par la liberté offerte par un suivi en différé.

## LISTE DES FORMATIONS DONNANT ACCÈS DE DROIT :

### M1 CHIMIE THEORIQUE ET MODELISATION (EMCHTE)

Pour les étudiants ayant suivi une autre formation que l'année précédente du parcours, l'accès est sur dossier. Il est très fortement conseillé de se rapprocher du responsable de la formation envisagée pour en connaître les modalités d'accès.

# RUBRIQUE CONTACTS

---

## CONTACTS PARCOURS

### RESPONSABLE M2 CHIMIE THÉORIQUE ET MODÉLISATION

JOLIBOIS Franck

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

Téléphone : 0561559638

POTEAU Romuald

Email : [romuald.poteau@univ-tlse3.fr](mailto:romuald.poteau@univ-tlse3.fr)

Téléphone : (INSA) 0561559664

### SECRÉTAIRE PÉDAGOGIQUE

BOURREL Céline

Email : [celine.bourrel@univ-tlse3.fr](mailto:celine.bourrel@univ-tlse3.fr)

Téléphone : 05.61.55.65.37

Université Paul Sabatier

U2 rdc porte 26

118 route de Narbonne

31062 TOULOUSE cedex 9

## 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 : [christel.causserand-alexandrovitch@univ-tlse3.fr](mailto:christel.causserand-alexandrovitch@univ-tlse3.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

9

page	Code	Intitulé UE	ECTS	Obligatoire Facultatif	Cours	TD	TP	Projet	Stage
<b>Premier semestre</b>									
8	EICHT3AM	MÉTHODOLOGIE DE LA CHIMIE QUANTIQUE	3	O	10	20			
9	EICHT3BM	MÉTHODES NUMÉRIQUES	3	O	10	20			
10	EICHT3CM	MODÉLISATION DES MATÉRIAUX	3	O	10	20			
11	EICHT3DM	MODÉLISATION MULTI-ÉCHELLE EN PHYSIQUE ET EN CHIMIE	3	O	15	15	6		
12	EICHT3EM	PROJET CHIMIE THÉORIQUE	6	O		6		50	
13	EICHT3FM	RÉACTIVITE ORGANOMÉTALLIQUE THÉORIQUE	3	O		30			
14	EICHT3GM	PROFESSIONNALISATION	6	O	30	30			
15	EICHT3VM	ANGLAIS	3	O		24			
<b>Second semestre</b>									
16	EICHT4AM	STAGE	30	O					5

---

## LISTE DES UE

---

<b>UE</b>	<b>MÉTHODOLOGIE DE LA CHIMIE QUANTIQUE</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>EICHT3AM</b>	Cours : 10h , TD : 20h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

HEITZ Marie Catherine

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

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Ce module est une préparation à la poursuite d'études doctorales dans le domaine de la chimie théorique et spécialement dans le domaine de la chimie quantique. Les développements méthodologiques récents et le développement de logiciels de plus en plus performants ont démocratisé l'usage des logiciels de chimie quantique. Le but de ce module est d'exposer les concepts fondamentaux de la chimie quantique et le formalisme des méthodes les plus couramment utilisées pour la description de la structure électronique et de la dynamique nucléaire.

#### Compétences visées :

- utiliser de façon éclairée des logiciels de chimie théorique et modélisation et notamment de chimie quantique
- contribuer à des développements méthodologiques des principaux outils de chimie théorique

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Le module contient des enseignements dans les domaines de la structure électronique et de la dynamique moléculaire . Le formalisme des différentes méthodes et leur domaine d'application seront détaillés pour permettre une utilisation éclairée des logiciels de chimie théorique et notamment quantique.

#### (1) structure électronique

- Hartree-Fock
- corrélation électronique, interaction de configurations, coupled cluster
- Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT)

#### (2) dynamique nucléaire

- dynamique classique et ab initio (Car Parrinello, Born-Oppenheimer, « propagateurs », ensembles thermodynamiques, calcul d'énergie libre)
- dynamique quantique des processus photos-induits (paquet d'ondes, dynamique adiabatique et non-adiabatique, lien avec le spectre d'absorption, représentation diabatique, dynamique mixte classique-quantique)

### PRÉ-REQUIS

bases de la mécanique quantique, oscillateur harmonique quantique, orbitales moléculaires, Hückel, équations de Newton

### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- Modern Quantum Chemistry, A. Szabo, N. S. Ostlund, Dover Publications Inc
- Computer Simulation of Liquids, M. P. Allen, D. J. Tildesley, Oxford Science Publications
- Photodissociation Dynamics, R. Schinke, Cambridge University Press

### MOTS-CLÉS

Chimie quantique/Hartree-Fock/théorie de la fonctionnelle de la densité/interaction de configurations/dynamique moléculaire classique, quantique/paquet d'ondes



<b>UE</b>	<b>MÉTHODES NUMÉRIQUES</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>EICHT3BM</b>	Cours : 10h , TD : 20h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

POTEAU Romuald

Email : [romuald.poteau@univ-tlse3.fr](mailto:romuald.poteau@univ-tlse3.fr)

Téléphone : (INSA) 0561559664

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Au cours de cet enseignement, les étudiants verront les principales méthodes numériques utilisées dans les logiciels scientifiques.

#### Compétences visées :

- travailler en autonomie : établir des priorités, gérer son temps
- développer des outils numériques pour la chimie
- utiliser le système Linux
- exprimer diverses méthodes numériques sous forme d'algorithme
- convertir un algorithme en un langage de programmation
- savoir lesquels de ces méthodes et outils sont utilisés dans d'autres domaines extérieurs à la chimie
- concevoir et développer des outils informatiques en autonomie, depuis un cahier des charges jusqu'à la réalisation de l'outil final
- utiliser des outils numériques de travail collaboratif (wiki, blogs, YouTube...)

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

- Interpolation, Extrapolation et Intégration
- Diagonalisation
- Systèmes linéaires, Racines et Extrema
- Equations différentielles
- Ajustement d'un modèle
- Méthodes spectrales et pseudo-spectrales

### PRÉ-REQUIS

Bases de programmation impérative et procédurale, langage de programmation pour le calcul scientifique (Fortran 95 par exemple).

### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Wetterling, B.P. Flannery, *Numerical Recipes*, Cambridge University Press, 1996.

### MOTS-CLÉS

Méthodes numériques - Intégration - Diagonalisation - Equations différentielles - Méthodes spectrales

<b>UE</b>	<b>MODÉLISATION DES MATÉRIAUX</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>EICHT3CM</b>	Cours : 10h , TD : 20h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

POTEAU Romuald

Email : [romuald.poteau@univ-tlse3.fr](mailto:romuald.poteau@univ-tlse3.fr)

Téléphone : (INSA) 0561559664

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Présenter les méthodes qui permettent d'explorer les propriétés physico-chimiques des matériaux par le calcul numérique. Donner les fondements mathématiques des outils numériques présentés dans le cadre de l'UE «Modélisation» au M1 et compléter les applications abordées dans le cadre de cette UE.

#### Compétences visées :

- utiliser des outils numériques de travail collaboratif (wiki, blogs, YouTube...)
- identifier quels sont les outils de modélisation adaptés à la description des matériaux
- définir et maîtriser les spécificités de la modélisation des matériaux par rapport à la modélisation moléculaire

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

#### *I- Introduction*

#### *II- Approche quantique : méthodes moléculaires*

1. Mécanique quantique et équation de Schrödinger. 2. Les méthodes monodéterminantes. 3. Prise en compte de la corrélation électronique : les méthodes post-Hartree Fock et DFT. 4. Etude des méthodes de la fonctionnelle de la densité (DFT). Application aux propriétés structurales des agrégats moléculaires. 5. Effets de l'environnement. 6. Application à la spectroscopie électronique

#### *III- Approche quantique : les systèmes périodiques*

1. La symétrie de translation. 2. La base des fonctions de Bloch. 3. Diagramme de bandes d'énergie. 4. Exemple d'application : calcul des spectres EELS. 5. Simulation des propriétés de surface. 6. Simulation des systèmes avec défauts. 7. Phénomènes d'adsorption : interface gaz/solide.

#### *IV- Dynamique moléculaire : approche classique*

1. Principe de la dynamique moléculaire. 2. Les champs de forces. 3. Application : effet de l'environnement sur les spectres électroniques de molécules organiques. 4. Vers les méthodes mixtes de type QM/MM.

### MOTS-CLÉS

Propriétés physico-chimiques des matériaux ; Approches quantiques - systèmes moléculaires ; systèmes périodiques

<b>UE</b>	<b>MODÉLISATION MULTI-ÉCHELLE EN PHYSIQUE ET EN CHIMIE</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>EICHT3DM</b>	Cours : 15h , TD : 15h , TP : 6h		

### 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 aux méthodes de modélisation que l'on trouve dans différents domaines en lien avec le vivant et la santé. Cet enseignement s'adressant à un public issu d'horizons très différents, un effort sera mis sur les similitudes des approches utilisées pour simuler différents types de processus physiques, chimiques ou mécaniques.

Compétence visée :

Modéliser et caractériser différents phénomènes physiques, chimiques ou mécaniques au sein de systèmes biologiques et/ou de la matière vivante.

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Les heures d'enseignements du module sont réparties en 15h de Cours et 21h de TD/TP.

Le cours abordera les notions de calculs de potentiels en chimie, physique et mécanique, d'exploration de l'espace des phases (méthode de type Dynamique Moléculaire, Monté-Carlo, Recuit Simulé, ...) de traitement multi échelle au niveau spatial et temporel. Des aspects plus numériques seront également abordés afin de sensibiliser les étudiants à certaines méthodes de résolution (méthode des éléments finis, ...).

La partie TD/TP du module sera consacrée à la réalisation d'un projet en lien avec les thématiques abordées dans le cours et en adéquation avec l'origine disciplinaire de chaque étudiant. Parmi les thématiques qui pourraient être abordées, on trouvera (liste non exhaustive, fournie à titre d'exemple) : la microcirculation sanguine, la translocation d'un polymère à travers un nanopore, la propagation d'ondes dans la matière vivante, la forme des vésicules élastiques, le docking moléculaire, les phénomènes de réaction-diffusion (processus non-linéaires),...

### PRÉ-REQUIS

Pour les étudiants chimistes, des connaissances en modélisation sont nécessaires (voir module M1).

### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

[color=black]The art of Molecular Dynamics Simulation, [/color]D.C. Rapaport,[color=black]Cambridge Univ. Press, 2004.[/color]

### MOTS-CLÉS

Multi-échelle, Modélisation, Calcul de potentiels, Exploration de l'espace des configurations, Pluridisciplinarité

<b>UE</b>	<b>PROJET CHIMIE THÉORIQUE</b>	<b>6 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>EICHT3EM</b>	TD : 6h , Projet : 50h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

POTEAU Romuald

Email : [romuald.poteau@univ-tlse3.fr](mailto:romuald.poteau@univ-tlse3.fr)

Téléphone : (INSA) 0561559664

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

L'objectif est d'acquérir des compétences fortes en chimie théorique par la découverte ou l'approfondissement de diverses thématiques.

#### Compétences visées :

- maîtriser une large palette d'outils conceptuels et numériques pour conduire des études théoriques en chimie et physico-chimie
- exploiter et analyser les résultats issus de calculs basés sur les principales méthodes de la chimie théorique
- appliquer quelques-uns des outils de base de la chimie théorique
- mettre en œuvre un projet : définir les objectifs et le contexte, réaliser et évaluer l'action, rédiger un rapport d'activités
- définir et mettre en œuvre une stratégie de modélisation numérique à partir d'un problème expérimental en chimie, ou bien aux frontières avec la physique et la biochimie

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Ce module est organisé en deux phases : (i) des cours-séminaires en ligne, délivrés tout au long du premier semestre ; (ii) une semaine de formation intensive au début du mois de janvier, sur l'un des sites du pôle Sud-Ouest du Réseau Français de Chimie Théorique (Bordeaux, Montpellier, Pau, Toulouse).

Les thèmes abordés sont :

- chimie quantique et relativité
- méthodes Monte-Carlo
- exploration des surfaces d'énergie potentielle
- calcul de la structure électronique de systèmes périodiques
- dynamique quantique
- calcul de propriétés spectroscopiques

### PRÉ-REQUIS

Bases de la mécanique quantique

### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Szabo, A. & Ostlund, N. S. *Modern Quantum Chemistry : Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*. Dover Publications, 1989

### MOTS-CLÉS

Dynamique moléculaire ; Monte-Carlo ; Effets relativistes ; Chimie Quantique

UE	RÉACTIVITE THÉORIQUE	ORGANOMÉTALLIQUE	3 ECTS	1 <sup>er</sup> semestre
EICHT3FM	TD : 30h			

## ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

MARON Laurent

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

## OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Des exemples de réactions de la catalyse homogène seront présentés en insistant sur les concepts sous-jacents et les limitations des approches théoriques (DFT principalement). La métathèse des oléfines et des exemples de polymérisation illustreront la catalyse supportée, en insistant sur l'influence du support.

Divers exemples illustreront la spécificité des nanocatalyseurs, en distinguant le rôle respectif des facteurs électroniques et géométriques.

### Compétences visées :

- faire le lien entre propriétés électroniques, mécanismes réactionnels multi-étapes et observations expérimentales
- interpréter la structure électronique de complexes de métaux d et f et de nano-objets organiques et inorganiques
- identifier les principales méthodes utilisées pour explorer la réactivité chimique

## DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

### (1) Catalyse homogène

- (a) Champ de ligand, classification des ligands, décompte électronique, diagrammes d'OM ML6 octaédrique et ML4 plan carré, diagrammes de Walsh
- (b) Pseudopotentiels atomiques, définition des modèles chimiques, précision
- (c) Quelques exemples : activations de liaisons (C-H, C-X), insertion, métathèse
- (d) La chimie rédox : transfert mono- vs. biélectronique, activation de CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>
- (e) Comparaison entre catalyse homogène et hétérogène : Cas de polymérisation Ziegler-Natta

### (2) Catalyse supportée

- (a) Quelques éléments sur la surface de greffage (silice, alumine)
- (b) Effet de la surface sur quelques réactions choisies : Polymérisation par ouverture de cycle, polymérisation des oléfines, métathèse des oléfines, activation de liaisons

### (3) Nanocatalyseurs

- (a) Où sont les électrons ? Nature des liaisons ? Application à des systèmes modèles (polymères et clusters organométalliques).
- (b) Relation taille / morphologie - activité catalytique
- (c) Réaction de Fischer-Tropsch, activation C-H, réactions d'hydrogénation
- (d) Descripteurs de réactivité : relation BEP, principe de Sabatier, courbes volcan.
- (e) Quelques grands enjeux actuels : énergie, biomasse, CO<sub>2</sub>

## PRÉ-REQUIS

Orbitales atomiques et moléculaires ; structure de bandes des solides ; théorie du champ des ligands ; méthode de Hückel

## RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

F.A. Cotton, G. Wilkinson *et al*, Advanced Inorganic Chemistry, Wiley 1999

R. Hoffman, How Chemistry and Physics Meet in the Solid State, *Angew Chem Int Ed* **26**(1987) 846

G. Schmid, Nanoparticles. From theory to application, Wiley 2010

## MOTS-CLÉS

Nanocatalyse, Catalyse homogène, Catalyse supportée, Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

<b>UE</b>	<b>PROFESSIONNALISATION</b>	<b>6 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>EICHT3GM</b>	Cours : 30h , TD : 30h		

### ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

BEDOS Florence

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

Téléphone : 68.00

### 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.

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Cet enseignement est constitué de quatre parties complémentaires.

- 1) Les principaux outils nécessaires à un manager : outils de management, marketing, notions de business plan.
- 2) Législation : Propriété intellectuelle, propriété industrielle et valorisation.
- 3) Des conférences ou ateliers assurés par des professionnels du secteur pour un échange direct entre les étudiants et les professionnels en activité dans l'entreprise ou en laboratoire académique ; l'idée est d'apporter aux étudiants une meilleure connaissance du tissu industriel local et des thématiques scientifiques développées dans les laboratoires de recherche Toulousains.
- 4) Des conférences assurées par des chercheurs et professeurs invités pour une ouverture à la recherche au niveau national et international.

### PRÉ-REQUIS

Avoir réfléchi à son projet professionnel. Faire preuve de curiosité scientifique. S'intéresser au contexte socio-économique.

### MOTS-CLÉS

Management, business plan, marketing, valorisation, brevet

<b>UE</b>	<b>ANGLAIS</b>	<b>3 ECTS</b>	<b>1<sup>er</sup> semestre</b>
<b>EICHT3VM</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)

GILARD POTEAU Veronique

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

Téléphone : 0561558281

### OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Niveau C1 du CECRL (Cadre Européen de Certification en Langues)

Développer les compétences indispensables aux étudiant/es en vue de leur intégration dans la vie professionnelle.

Perfectionner les outils de communication permettant de s'exprimer dans le contexte international d'aujourd'hui et acquérir l'autonomie linguistique nécessaire à cette intégration.

### DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Enseignement axé sur le travail de l'expression orale

Documents du domaine de spécialité pouvant faire l'objet de collaboration entre enseignants de science et enseignants de langue

Nécessité d'un parcours individualisé répondant aux attentes de chaque étudiant.

CO - EE - EO - EE

- Savoir communiquer en anglais scientifique
- Savoir repérer les éléments constitutifs d'une communication écrite ou orale dans le domaine de spécialité
- Savoir prendre la parole en public (conférence ou réunion) dans le cadre d'un colloque, projet de recherche, projet professionnel

### PRÉ-REQUIS

N.A.

### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

N.A.

### MOTS-CLÉS

Projet - Repérer - Rédaction anglais scientifique - style - registre - critique - professionnel - commenter

<b>UE</b>	<b>STAGE</b>	<b>30 ECTS</b>	<b>2<sup>nd</sup> semestre</b>
<b>EICHT4AM</b>	Stage : 5 mois minimum		

**ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE**

ALARY Fabienne

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

Téléphone : 0561556948



# 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.



