

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

نموذج مطابقة و مواءمة

عرض تكوين ماستر أكاديمي
2025 – 2026

التخصص	الشعبة	ميدان
الكيمياء النظرية والحاسوبية	كيمياء	علوم المادة

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

**Canevas de mise en conformité et
harmonisation**

OFFRE DE FORMATION

L.M.D. LICENCE ACADEMIQUE

2025 – 2026

Domaine	Filière	Spécialité
SCIENCES DE LA MATIERE	CHIMIE	Chimie Théorique et Computationnelle

Master Chimie Théorique et Computationnelle

Semestre 1

Unité d'enseignement	Matières	VHS 15 semaines	V.H hebdomadaire			Autres*	Coeffi	Crédits	Mode d'évaluation	
	Intitulé		Cours	TD	TP				Continu	Examen
UE Fondamentale Code: UEF1 Crédits : 18 Coefficients : 9	Chimie quantique avancée 1	67h30	3h00	1h30		82h30	3	6	33%	67%
	Spectroscopie moléculaire avancée 1	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
	Mécanique moléculaire	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
	Réactivité chimique théorique	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
UE Méthodologique Code : UEM Crédits : 9 Coefficients : 5	TP chimie quantique <u>avancée</u> 1	22h30			1h30	27h30	1	2	50%	50%
	TP Spectroscopie Moléculaire avancée 1	22h30			1h30	27h30	1	2	50%	50%
	TP Réactivité chimique et mécanique moléculaire	22h30			1h30	27h30	1	2	50%	50%
	Informatique	22h30			1h30	27h30	1	2	50%	50%
	Intelligence artificielle et Machine Learning 1	15h00			1h00	10h00	1	1	50%	50%
UE Découverte Code:UED1 Crédits : 1 Coefficients : 1	Choisir une matière : - Chimie organique 1 - Chimie des substances naturelles	22h30	1h30			02h30	1	1		100 %
UE Transversale Code: UET1 Crédits : 2 Coefficients : 2	Cinétique moléculaire	22h30	1h30			02h30	1	1		100 %
	Rédaction académique/ Recherche bibliographique	22h30	1h30			02h30	1	1		100 %
Total semestre 1		375h00	12h00	6h00	7h00	375h00	17	30		

Autres* : Travail complémentaire en consultation semestrielle.

Master Chimie Théorique et Computationnelle

Semestre 2 :

Unité d'enseignement	Matières	VHS 15 semaines	V.H hebdomadaire			Autres*	Coeffi	Crédits	Mode d'évaluation	
	Intitulé		Cours	TD	TP				Continu	Examen
UE Fondamentale Code: UEF2 Crédits : 18 Coefficients : 9	Chimie quantique avancée 2	67h30	3h00	1h30		82h30	3	6	33%	67%
	Spectroscopie moléculaire avancée 2	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
	Dynamique Moléculaire	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
	Interactions moléculaires et DFT conceptuelle	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
UE Méthodologique Code: UEM2 Crédits : 9 Coefficients : 5	TP chimie quantique et spectroscopie	22h30			1h30	27h30	1	2	50%	50%
	Statistiques, analyse de données et chimiométrie	45h00	1h30		1h30	55h00	2	4	50%	50%
	TP dynamique moléculaire et DFT conceptuelle	22h30			1h30	27h30	1	2	50%	50%
	Intelligence artificielle et Machine Learning 2	15h00			1h00	10h00	1	1	50%	50%
UE Découverte Code: UED2 Crédits : 2 Coefficients : 2	Mathématiques appliquées	22h30	1h30			02h30	1	1		100%
	Choisir une matière : - Chimie organique 2 - Phytochimie - Chromatographie	22h30	1h30			02h30	1	1		100%
UE Transversale Code: UET2- Crédits : 1 Coefficients : 1	Exploration de Logiciels Open Source dans la spécialité	22h30	1h30			02h30	1	1		100%
Total semestre 2		375h00	13h30	6h00	5h30	375h00	17	30		

Autres* : Travail complémentaire en consultation semestrielle.

Master Chimie Théorique et Computationnelle

Semestre 3 :

Unité d'enseignement	Matières	VHS 15 semaines	V.H hebdomadaire			Autres *	Coeffi	Crédits	Mode d'évaluation	
	Intitulé		Cours	TD	TP				Continu	Examen
UE Fondamentale Code: UEF3 Crédits : 18 Coefficients : 9	Chimie quantique avancée 3	67h30	3h00	1h30		82h30	3	6	33%	67%
	Thermodynamique statistique	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
	Chimie du solide	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
	Modélisation QSPR/QSAR et Docking Moléculaire	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
UE Méthodologique Code: UEM3 Crédits : 9 Coefficients : 5	TP chimie quantique avancée 3	22h30			1h30	27h30	1	2	50%	50%
	Spectroscopie du laser	45h00	1h30		1h30	55h00	2	4	50%	50%
	TP Modélisation QSPR/QSAR et Docking Moléculaire	22h30			1h30	27h30	1	2	50%	50%
	Programmation et intelligence artificielle 2	15h00			1h00	10h00	1	1	50%	50%
UE Découverte Code: UED3 Crédits : 2 Coefficients : 2	Choisir une matière : - Colloïdes - Thermodynamique chimique avancée - Chimie du vivant - Analyse mathématique	22h30	1h30			02h30	1	1		100%
	Choisir une matière : - Biochimie - Chimie des matériaux - Chimie thérapeutique	22h30	1h30			02h30	1	1		100%
UE Transversale Code: UET3 Crédits : 1 Coefficients : 1	Entreprenariat, Startups, et Innovation	22h30	1h30			02h30	1	1		100%
Total semestre 3		375h00	13h30	6h00	5h30	375h00	17	30		

Autres* : Travail complémentaire en consultation semestrielle.

M1

SEMESTRE 1

Semestre: 1

Unité d'enseignement: UEF1-M1S1

Matière 1: Chimie Quantique Avancée 1

Objectifs de l'enseignement : Cette matière permettra à l'étudiant de se familiariser avec le fondement théorique et le formalisme des méthodes de la chimie quantique.

Connaissances préalables recommandées : Notions de base en mécanique quantique et chimie quantique acquises en licence.

Contenu de la matière :

1. Rapports sur les bases de la mécanique quantique (4 semaines)
 - 1.1 Origine de la mécanique quantique
 - 1.2 Concept de quantification
 - 1.3 Postulats de la mécanique quantique
 - 1.4 Dualité onde-corpuscule
 - 1.5 Principe d'incertitude d'Heisenberg
 - 1.6 Principe de Pauli, principe d'indiscernabilité et déterminant de Slater
 - 1.7 Hamiltonien d'un atome et hamiltonien d'une molécule
 - 1.8 Approximation de Born-Oppenheimer
- 2- Méthodes d'approximation (2 semaines)
 - 2.1 Méthode de variations OM-CLOA (exemple : ion moléculaire H_2^+)
 - 2.2 Méthode de perturbations (Exemple : atome d'Helium He)
- 3-Méthode SCF de Hartree-Fock-Roothaan (3 semaines)
 - 3.1 Approximation du champ moyen de Hartree
 - 3.2 Méthode de Hartree-Fock
 - 3.3 Méthode de Hartree-Fock-Roothaan
 - 3.4 Intégrales moléculaires
- 4-Bases d'orbitales atomiques (3 semaines)
 - 4.1 Introduction
 - 4.2 Base NHFO (Numerical Hartree-Fock Orbitals)
 - 4.2 Base STO (Slater-type orbitals)
 - 4.3 Base GTO (Gaussian-type orbitals)
- 5-Méthodes Post-SCF (3 semaines)
 - 5.1 Défauts de la méthode SCF de Hartree-Fock
 - 5.2 Energie de corrélation
 - 5.3 Méthodes CI (*Configuration Interaction*)
 - 5.4 Méthodes de Moller-Plesset MP2.

Mode d'évaluation : Contrôles continus (33%) + Examen final (67%)

Références bibliographiques :

- Ira N. Levine, "Quantum Chemistry", 7th Edition, Pearson (2014).
- Christopher J. Cramer, "Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models", 2nd Edition, Wiley (2004).
- Frank Jensen, "Introduction to computational Chemistry, Wiley (1999)
- A. R. Leach, "Molecular Modelling, Principles and Applications, Prentice Hall (199

Semestre: 1

Unité d'enseignement: UEF1-M1S1

Matière 1: Spectroscopie Moléculaire Avancée 1

Objectifs de l'enseignement: La spectroscopie moléculaire permet entre autres, l'identification d'une espèce chimique dans une substance inconnue, l'obtention de renseignements sur la structure de la matière étudiée, l'obtention de renseignements sur les conditions physiques qui règnent dans la source émettrice du rayonnement, ...

Connaissances préalables recommandées: structure de la matière ; notions de mécanique quantique

Contenu de la matière:

Chapitre I : Symétrie moléculaire et théorie des groupes (2 semaines)

- I.1. Introduction
- I.2. Définitions et théorèmes de la théorie des groupes
- I.3. Eléments, opérations et groupes ponctuels de symétrie
- I.4. Représentations matricielles des groupes de symétrie
- I.5. Les tables de caractères

Chapitre II : Application de la théorie des groupes à la construction des orbitales hybrides (3 semaines)

- II.1 Application de la théorie des groupes à la construction des orbitales hybrides
- II.2 Propriétés de transformation des orbitales atomiques
- II.3 Introduction de l'opérateur de projection
- II.4 Schéma d'hybridation pour la formation des liaisons σ

Chapitre III : (3 semaines)

- III.1 Introduction à la Théorie du champ des ligands
- III.2 Structure électronique de l'ion libre.
- III.3 Eclatement des niveaux d'énergie dans un environnement chimique.

Chapitre IV : Généralités sur la spectroscopie moléculaire (1 semaine)

- I.1.Introduction
- I.2. Interaction rayonnement-matière
- I.3. Principales caractéristiques d'une raie spectrale
- I.4. Présentation d'un spectre d'absorption

Chapitre V : Vibration des molécules polyatomiques (3 semaines)

- II.1. Coordonnées normales et expression de l'Hamiltonien
- II.2. Niveaux d'énergie et fonctions d'onde
- II.3. Règles de sélection pour les vibrations fondamentales
- II.4. Bases de représentations réductibles pour l'étude des vibrations
- II.5. Représentations irréductibles des modes normaux de vibration

Chapitre VI : Rotation des molécules polyatomiques (3 semaines)

- III.1.Introduction
- III.2. Expression de l'énergie de rotation
- III.3. Classification des rotateurs rigides
- III.4. Spectre de rotation des différents types de rotateurs

Mode d'évaluation: Contrôle continu : 33.% ; Examen Final: 67 %.

Références bibliographiques :

1. P.F. BERNATH, *Spectra of Atoms and Molecules*. Oxford University Press (2020)
2. E. BIEMONT, *Spectroscopie Moléculaire, Structures Moléculaires et Analyse Spectrale*. De Boeck (2008)
3. J.M. HOLLAS, *Spectroscopie : Cours & Exercices*. Dunod (2003)

Semestre: 1**Unité d'enseignement: UEF2-M1S1****Matière 1: Mécanique Moléculaire****Objectifs de l'enseignement:**

L'enseignement vise à fournir les bases théoriques et pratiques nécessaires à la construction, à la simulation et à l'interprétation des différents modèles de champs de force, tout en sensibilisant les étudiants aux limites de cette approche et à ses principales applications.

Connaissances préalables recommandées:

Cet enseignement est nouveau et ne figure pas dans le cursus de la licence

Contenu de la matière:**Chapitre I : Contexte de la mécanique moléculaire (3 semaines)****I.1 Introduction générale**

- Définition et objectifs de la mécanique moléculaire
- Comparaison avec les méthodes de chimie quantique
- Domaines d'application (biologie, chimie, matériaux)

I.2 Rappels théoriques

- Rappels de mécanique classique
- Approximation classique des systèmes moléculaires
- Énergie potentielle et surface d'énergie

Chapitre II : Champs de force (5 semaines)**II.1 Fonction d'énergie potentielle ou champs de force**

- Interactions intramoléculaires
- Interactions intermoléculaires
- Evaluation des Interactions non liées

II.2 Comparaisons des champs de force

- Paramétrisation du champ de force
- Exemples de champs de force usuels (AMBER, MM2, CHARMM, etc.).

Chapitre III : Applications et limites (4 semaines)

- Cas typiques : petites molécules, complexes, polymères
- Avantages et limites de la mécanique moléculaire
- Perspectives d'utilisation en combinaison avec d'autres méthodes

Chapitre IV : Minimisation (3 semaines)

- Formulation de la minimisation
- Minimum local et global
- Différentes méthodes de minimisation

Mode d'évaluation: Contrôles continus: 33% ; Examen final : 67 %.

Références bibliographiques :

- Ira N. Levine, "Quantum Chemistry", 7th Edition, Pearson (2014).

- Christopher J. Cramer, *“Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models”*, 2nd Edition, Wiley (2004).
- Frank Jensen, *“Introduction to computational Chemistry*, Wiley (1999)
- A. R. Leach, *“Molecular Modelling, Principles and Applications*, Prentice Hall (1996)

Semestre: 1**Unité d'enseignement: UEF2-M1S1****Matière 1: Réactivité chimique théorique****Objectifs de l'enseignement:**

Former les étudiants à comprendre, interpréter et modéliser la réactivité chimique à partir des principes de la chimie quantique et des surfaces d'énergie potentielle, en s'appuyant sur la Théorie des États de Transition comme cadre central d'analyse cinétique.

Connaissances préalables recommandées:

Cet enseignement est nouveau et ne figure pas dans le cursus de la licence

Contenu de la matière:**Chapitre 1 : Introduction à la réactivité chimique (4 semaines)**

1. Définitions et concepts fondamentaux
2. Énergie potentielle, surface d'énergie potentielle (PES)
3. Réactions élémentaires vs réactions globales
4. Théories cinétiques de base (loi d'Arrhenius, collisions, etc.)

Chapitre 2 : Principes fondamentaux de la Théorie des États de Transition (4 semaines)

1. Historique et fondements de la TST (*Transition State Theory*)
2. Hypothèses de base : équilibre quasi-statique, coordonnées réactionnelles
3. Complexe activé et l'état de transition
4. Lien entre TST et la constante de vitesse

Chapitre 3 : Formulation mathématique de la TST (4 semaines)

1. Expression générale de la constante de vitesse
2. Rôle de la température et de la barrière d'activation
3. Entropie, enthalpie et énergie libre d'activation (formalisme d'Eyring)

Chapitre 4 : Limites et extensions de la TST (3 semaines)

1. Tunnel quantique et corrections semi-classiques
2. Théorie de la TST variationnelle (VTST)
3. Influence du solvant et des effets dynamiques
4. Comparaison avec la théorie RRKM et la dynamique classique

Chapitre 5 : Théorie des orbitales moléculaires frontières FMO (3 semaines)

- II.1 Principe de la FMO
- II.2 Limitations de la théorie FMO

II.3 Critiques de la FMO

Mode d'évaluation: Contrôles continus : 33% ; Examen final : 67%

Références bibliographiques :

- Ira N. Levine, "*Quantum Chemistry*", 7th Edition, Pearson (2014).
- Christopher J. Cramer, "*Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*", 2nd Edition, Wiley (2004).
- Donald G. Truhlar, Anthony G. Garrett, Bruce C. Garrett, "*Variational Transition State Theory*", Acc. Chem. Res., 1980.
- Joaquim C. Lima, Maria J. Ramos, "*Reaction Paths and Transition States*", dans "Reviews in Computational Chemistry", Vol. 23, Wiley (2007).
- M. T. Nguyen, A. T. T. Nguyen, "*Transition Structures and Reaction Mechanisms*", Springer (2020).

Semestre: 1**Unité d'enseignement: UEM1-M1S1****Matière 1: TP chimie quantique avancée****Objectifs de l'enseignement:**

Les TP de chimie quantique avancée 1 moléculaire ont pour objectif l'apprentissage d'utiliser les programmes de calculs quanto-chimiques. Chaque TP contient une série d'exercices pratiques.

Connaissances préalables recommandées:

Cet enseignement est nouveau et ne figure pas dans le cursus de la licence

Contenu de la matière:

TP N°01 : Apprentissage de l'utilisation du Logiciel HyperChem (2 semaines)

TP N°02 : Apprentissage de l'utilisation du Logiciel AMPAC (2 semaines)

TP N°03 : Apprentissage de l'utilisation du Logiciel Schrodinger (2 semaines)

TP N°04 : Apprentissage de l'utilisation des Logiciels Gaussian/GaussView (3 semaines)

TP N°05 : Calculs Hartree-Fock-Roothaan sur Hyperchem (2 semaines)

TP N°06 : Calculs Hartree-Fock-Roothaan sur Gaussian/Gaussview (2 semaines)

TP N°07 : Calculs CI et MP2 sur Hyperchem, Gaussian/Gaussview (2 semaines)

Mode d'évaluation: Contrôles continus : 100%

Références bibliographiques :

- <http://www.hypercubeusa.com>.
- <https://www.ampaconline.org>
- <https://www.schrodinger.com/documentation>
- <https://www.gaussian.com>
- <https://gaussian.com/gaussview6/>

Semestre: 1

Unité d'enseignement: UEM1-M1S1

Matière 1: TP Mécanique Moléculaire

VHS: 22h30 (TP: 1h30)

Objectifs de l'enseignement:

Les TP de mécanique moléculaire ont pour objectif d'enseigner la modélisation des systèmes moléculaires à l'échelle atomique à l'aide de champs de force classiques. Ils permettent aux étudiants d'évaluer la stabilité, la géométrie et l'énergie d'un système à l'équilibre, sans prise en compte explicite de son évolution dans le temps.

Connaissances préalables recommandées:

Cet enseignement est nouveau et ne figure pas dans le cursus de la licence

Contenu de la matière:

TP N°01 : Optimisation de la géométrie d'un ligand bioactif par mécanique moléculaire (MM). (2 semaines)

TP N°02 : Évaluation de la stabilité énergétique d'un complexe médicament-récepteur par mécanique moléculaire (MM). (3 semaines)

TP N°03 : Analyse de la conformation des molécules flexibles. (2 semaines)

TPN°04 : Effet du solvant sur la géométrie et l'énergie des molécules et complexes modèles par MM. (2 semaines)

TPN°05 : Évaluation MM des énergies relatives de conformères ou stéréoisomères et estimation des ratios des produits à l'équilibre. (2 semaines)

TPN°06 : Évaluation de l'énergie de liaison d'un complexe ligand-récepteur par les méthodes MM-GBSA et MM-PBSA. (2 semaines)

Mode d'évaluation: Contrôles continus : 100%

Références bibliographiques :

- <http://www.hypercubeusa.com>
- <https://www.schrodinger.com/documentation>
- <https://www.schrodinger.com/tutorials>
- <http://www.gromacs.org/Documentation>
- <http://www.gromacs.org/Documentation/Tutorials>

Semestre: 1**Unité d'enseignement: UEM1-M1S1****Matière 1: TP réactivité chimique 1 (TPRC1)****Objectifs de l'enseignement:**

Initier les étudiants à la modélisation d'un mécanisme réactionnel par la localisation, la caractérisation et la validation d'un état de transition, et leur permettre de relier ces données théoriques aux paramètres cinétiques d'une réaction.

Connaissances préalables recommandées:

Cet enseignement est nouveau et ne figure pas dans le cursus de la licence

Contenu de la matière:

TP N°01 : Recherche et validation d'un état de transition TS par calcul de fréquences vibratoires.

(2 semaines)

TP N°02 : Caractérisation d'un état de transition par suivi IRC (*Intrinsic Reaction Coordinate*).

(2 semaines)

TP N°03 : Recherche d'un état de transition: application à une réaction modèle. (2 semaines)

TP N°04 : Étude théorique d'une réaction SN2 : du complexe réactif au TS. (2 semaines)

TP N°05 : Réaction Diels-Alder : recherche du TS et étude de la régiosélectivité. (3 semaines)

TP N°06 : Effet du solvant sur l'état de transition : Application à une réaction [3+2]. (2 semaines)

Mode d'évaluation: Contrôles continus: 100%

Références bibliographiques :

- <http://www.hypercubeusa.com>.
- <https://www.schrodinger.com/documentation>
- <https://www.schrodinger.com/tutorials>
- <https://www.gaussian.com>

Semestre: 1

Unité d'enseignement: UEM1-M1S1

Matière 1: Informatique

Connaissances préalables recommandées (descriptif succinct des connaissances requises pour pouvoir suivre cet enseignement – Maximum 2 lignes). Connaissance de base d'analyse numérique, d'algorithmique et de système Windows.

Contenu de la matière :

CHAPTER 1 : INTRODUCTION TO COMPUTER SCIENCE (2 semaine)

- Hardware
 - Computer classes and configurations
 - Computer components
 - Introduction to Data Representation
- Software
 - System software
 - Application software
 - Utility software
 - Embedded software &
 - Programming languages (Fortran , C, and C++)

CHAPTER 2 : LINUX SYTEM (UBUNTU) (3 semaine)

- Introduction to Linux
- System Installation
- Desktop Essentials
- Command Line Essentials
- Permissions & User Management
- Installing scientific software and tools
- Scripting basics

CHAPTER 3: FORTRAN BASICS (3 semaine)

- Introduction to Fortran
History, features, and typical applications
- Basic Syntax
Program structure, blocks, comments
- Variables and Data Types
Integer, real, double precision, character, logical types
- Arithmetic and Logical Operations
- Input/Output (I/O)
Reading from and writing to the console, simple file operations
- Control Flow
Conditional statements (if, else if, else)
- Loops
do loops, nested loops
- Arrays and Matrices
Declaration, access, manipulation
- Subprograms
Functions and subroutines

- Error Handling
Basic introduction to error handling

CHAPTER 4: C++ BASICS (3 semaine)

- Introduction to C++
History, features, and use in computational chemistry
- Basic Syntax
Program structure, comments
- Variables and Data Types
Basic types (int, float, double, char, bool)
- Arithmetic and Logical Operations
- Input/Output (I/O)
Using cin and cout
- Control Flow
Conditional statements (if, else if, else, switch)
- Loops
for, while, do-while loops
- Arrays and Strings
Declaration, access, manipulation
- Functions
Declaration, definition, pass by value and reference
- Introduction to Object-Oriented Programming (OOP)
Basic concepts of classes and objects

CHAPTER 5 : PYTHON BASICS (3 semaine)

- Introduction
- Variables and Data Types
- Input and Output (I/O)
- Conditional Statements (if, else, elif)
- Loops (for, while)
- Data Structures
 - Lists
 - Tuples
 - Dictionaries
 - Sets
- Functions

MINI-PROJECTS (1 semaine)

Mode d'évaluation : 67% Examen + 33% Continu

Références (*Livres et photocopiés, sites internet, etc*).

References

Modern Fortran Explained (Numerical Mathematics and Scientific Computation) Michael Metcalf, oxford, 2011

Fortran 95/2003 for Scientists & Engineers Stephen J. Chapman, McGraw-Hill, 2007

LAPACK95 Users' Guide (Software, Environments and Tools) V. A. Barker, L. S. Blackford, J. Dongarra and J. Du Croz 2001

Gnuplot in Action: Understanding Data with Graphs Philipp K. Janert, Manning Publications, 2009)

Unité d'enseignement: Methodologie

Matiere : Intelligence artificielle et Machine Learning 1

Objectifs du cours :

Introduire les bases de l'IA et de l'apprentissage automatique (Machine Learning), en se concentrant sur leurs applications dans les sciences de la matière. Les étudiants comprendront les concepts fondamentaux de la modélisation basée sur les données et comment appliquer les techniques de l'apprentissage automatique pour résoudre des problèmes du monde réel.

Contenu du cours :

- **Chapitre 1 : Introduction à l'IA et à l'apprentissage automatique**
 - Aperçu de l'IA et de ses applications.
 - Importance des données dans l'IA et l'apprentissage automatique.
- **Chapitre 2 : Concepts de base de l'apprentissage automatique**
 - Apprentissage supervisé ou non supervisé.
 - Algorithmes clés de l'apprentissage automatique : régression, classification, regroupement.
 - Mesures d'évaluation (MAE, R^2 , précision).
- **Chapitre 3 : Collecte et traitement des données**
 - Ingénierie des caractéristiques et techniques de prétraitement des données.
 - Traitement de l'ajustement excessif et de l'ajustement insuffisant.
 - Bases de données sur les matériaux : Materials Project, OQMD, AFLOW.
- **Chapitre 4 : Apprentissage automatique (Machine Learning) pratique en sciences de la matière**
 - Étude de cas : Prédiction des propriétés des matériaux (bande interdite, etc.).
 - Utilisation de modèles d'apprentissage automatique pour des tâches simples de classification et de régression.
- **Chapitre 5 : Fondements de l'apprentissage profond**
 - Introduction aux réseaux neuronaux.
 - Principaux cadres d'apprentissage profond : TensorFlow, Keras, PyTorch.
 - Application : Prédiction de la structure cristalline à l'aide de réseaux neuronaux.

Bibliographie :

- *"Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow"* by Aurélien Géron (focuses on practical applications of machine learning)
- *"Pattern Recognition and Machine Learning"* by Christopher M. Bishop (provides theoretical foundations of ML)

Outils et bibliothèques :

- Python, Jupyter Notebooks
- Scikit-learn, Pandas, Matplotlib
- Materials science tools: Matminer, Pymatgen

Semestre: 1

Unité d'enseignement: UED1-M1S1

Matière 1: Chimie organique 1

VHS: 22h30 (Cours: 1h30)

Objectifs de l'enseignement:

Cette matière devrait permettre à l'étudiant de se familiariser avec l'écriture des mécanismes réactionnels

et surtout d'apprendre tout d'abord à les interpréter pour pouvoir en proposer.

Connaissances préalables recommandées:

L'étudiant est censé connaître toutes les notions de Chimie Organique générale S3/L2 (Nomenclature,

Stereochimie, Effets électronique, Mécanismes réactionnels).

Contenu de la matière:

- **Chapitre 0 : Révisions des notions acquises en L2 (1 semaine)**
- **Chapitre I : Généralités sur les mécanismes réactionnels : (2 semaines)**
 - I.1. Diagrammes d'énergie
 - I.1.1. Rappels de thermodynamique et de Cinétique
 - I.1.2. Théorie de l'état de Transition
 - I.2. Postulat de Hammond
 - I.3. Contrôle Cinétique et Contrôle Thermodynamique d'une réaction
 - I.4. Intermédiaires Réactionnels
- **Chapitre II : Effets Isotopiques : (2 semaines)**
 - II.1. Effets Isotopiques primaires
 - II.2. Effets Isotopiques secondaires
 - II.3. Effets Isotopiques de solvant
- **Chapitre III : Réactions radicalaires et Photochimie (1 semaine)**
- **Chapitre IV : Réactions de Substitutions Nucléophiles (2 semaines)**
 - IV.1. Mécanisme SN1
 - IV.2. Mécanisme SN2
 - IV.3. Catalyse par Transfert de Phase
- **Chapitre V : Réactions d'Eliminations(3 semaines)**
 - V.1. Mécanisme E1
 - V.2. Mécanisme E2
 - V.3. Mécanisme E1cb
 - V.4. Orientation et Stereochimie de la réaction d'Elimination
- **Chapitre VI : Réactions d'Additions (2 semaines)**
 - VI.1. Additions de HX
 - VI.2. Hydratation
 - VI.3. Addition de X2
- **Chapitre VII : Substitutions Electrophiles Aromatiques (2 semaines)**

Mode d'évaluation: **Contrôles continus :** **100%**

Références bibliographiques :

- 1- « Chimie organique » (Allinger) Tome 1, 2 et 3
- 2- « Mécanismes Réactionnels en Chimie Organique » (Brückner)
- 3- « MARCH'S ADVANCED ORGANIC CHEMISTRY » Sixth ed.
M.B. SMITH and Jerry MARCH , Ed. WILEY INTERSCIENCE).

Semestre: 1

Unité d'enseignement: UED1-M1S1

Matière 1: Chimie des substances naturelles

VHS: 22h30 (Cours: 1h30)

Objectifs de l'enseignement

-Apporter une connaissance solide sur la synthèse chimique des molécules bio- organiques.

Connaissances préalables recommandées

L'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du tronc commun de la licence.

Chapitre 1 : Fondements des Substances Naturelles (2 semaine)

1. Définition et Origine

- Sources végétales, microbiennes et marines
- Importance en pharmacologie et écosystèmes

2. Classification Chimique

- Grandes familles : polyphénols, alcaloïdes, terpénoïdes, glucides
- Exemples structuraux de molécules bioactives

3. Méthodes d'Obtention

- Stratégies d'extraction (solvants, distillation)
- Techniques de purification (chromatographie, cristallisation)

Chapitre 2 : Chimie des Osides et Dérivés (3 semaine)

1. Structure des Monosaccharides

- Stéréochimie, formes cycliques et réactivité

2. Synthèse Glycosidique

- Méthodes de protection/déprotection
- Formation de liaisons osidiques (catalyse enzymatique vs chimique)

3. Polyosides Complexes

- Rôles biologiques (paroi cellulaire, glycoprotéines)
- Applications biomédicales

Chapitre 3 : Métabolites Secondaires(3 semaine)

1. Alcaloïdes

- Biosynthèse et propriétés pharmacologiques

2. Polyphénols

- Activité antioxydante et mécanismes d'action

3. Approches Analytiques

- Caractérisation par RMN et spectrométrie de masse

Chapitre 4 : Terpènes et Stéroïdes (3 semaine)

1. **Biosynthèse et Diversité Structurale**
 - Voies du mévalonate et MEP
2. **Stéroïdes Naturels**
 - Fonctions hormonales et dérivés semi-synthétiques
3. **Modifications Chimiques**
 - Stratégies d'hémisynthèse

Chapitre 5 : Ligation Chimique et Applications (2 semaine)

1. **Principes de la Ligation**
 - Native Chemical Ligation (NCL) et variantes
2. **Réactions Spécifiques**
 - Ligation de Staudinger
 - Méthodes "click chemistry"
3. **Conception de Bioconjugués**
 - Protéines hybrides et fonctionnalisation de surfaces
 - Synergies avec les substances naturelles

Chapitre 6 : Perspectives et Innovations (2 semaine)

1. **Ingénierie Métabolique**
 - Production de composés rares
2. **Découverte de Médicaments**
 - Approches modernes (screening virtuel)
3. **Défis Environnementaux**
 - Alternatives durables aux extractions classiques

Mode d'évaluation : continu et examen

Références :

- Santelli M. Chimie bio-organique. Lavoisier, 2012.
- Dugas ; Hermann. Introduction à la chimie bio-organique : de la molécule à la supramolécule jusqu'aux biomolécules. Librairie de l'Université de Montréal, 2000.
- McMurry J. ; Begley T. ; Chimie organique des processus biologiques. De Boeck Supérieur, 2006.

Semestre: 1

Unité d'enseignement: UED1-M1S1

Matière 1: Cinétique moléculaire

VHS: 22h30 (Cours: 1h30)

Objectifs de l'enseignement (Décrire ce que l'étudiant est censé avoir acquis comme Compétences après le succès à cette matière – maximum 3 lignes).

Les objectifs concernent : des connaissances factuelles relatives aux vitesses des réactions chimiques et à leur importance pratique, des connaissances plus abstraites liées aux concepts de lois de vitesse, de mécanismes réactionnels, des aspects méthodologiques relatifs à la description phénoménologiques de l'avancement des réactions et à l'établissement des mécanismes réactionnels.

Connaissances préalables recommandées (descriptif succinct des connaissances requises pour pouvoir suivre cet enseignement – Maximum 2 lignes).

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Généralité et Définitions (3 semaine)

- Introduction (Rôle de la cinétique et notion thermodynamique)
- Définition de la vitesse de réaction
- Classification des réactions chimiques
- Loi d'Arrhénius et son interprétation

Chapitre 2 : Lois simples des vitesses de réactions chimiques (5 semaine)

- Ordre d'une réaction et molécularité
- Constante de vitesse
- Temps de demi-réaction

Chapitre 3 : Cinétique des réactions composées (4 semaine)

- Réactions séries
- Réactions opposées
- Réactions parallèles

Chapitre 4 : Réactions complexes (3 semaine)

- Définition
- Cinétique des réactions complexes

Mode d'évaluation : 67% Examen + 33% Continu

Références

Upadhyay SK. Chemical kinetics and reaction dynamics. New York : New Delhi, India: Springer ; Anamaya; 2006.

Semestre: 1**Unité d'enseignement: UET2M1S1****Matière 1: Anglais Scientifique****VHS: 22h50 (Cours: 1h30)****Crédits: 1****Teaching Objectives**

- Foster the development of advanced proficiency in English reading, writing, and oral communication skills among students
 - Cultivate the ability to comprehend and critically analyse scientific documents (chemistry) written in English
 - Attain a high level of competence in translating scientific documents from French to English and from English to French

Recommended prior knowledge

The student is expected to demonstrate the following prerequisite competencies: the ability to read and comprehend English-language texts; the capacity to compose a clear and concise paragraph articulating his knowledge; and the skill to convey his thoughts orally in a coherent and structured manner, using a minimum of three correct consecutive sentences.

Course content**Chapter 1: (Energy and Dynamics) (05 weeks)**

- I.1. Lecture delivered in English on foundational principles of thermodynamics
- I.2. Summarization techniques; preparation of an English-language abstract based on a scientific text in the field of kinetics
- I.3. Oral discussions on key concepts in kinetics (Group work)
- I.4. Translation of a text on thermodynamics (from French to English)

Chapter 2: (Molecular Structure and Properties) (05 weeks)

- II.1. Presentation and elucidation in English of fundamental terminology specific to chemical bonding
- II.2. Analytical reading and thorough comprehension of a scientific article written in English on structure–function relationships of molecules
- II.3. Writing a structured summary of the analysed scientific article
- II.4. Organization of oral debate on key concepts in chemical bonding (Group work)
- II.5. Translation of a text related to structure–function relationships of molecules (from English to French)

Chapter 3: (Mechanistic Understanding) (05 weeks)

- III.1. Elucidation in English of the fundamental terminology associated with chemical reaction mechanisms
- III.2. Paraphrasing of a scientific excerpt on analytical techniques
- III.3. Delivery of oral presentations in English on selected topics related to their area of specialization (by the students).
- III.4. Introduction to writing a scientific article in accordance with academic standards and conventions.

Mode of assessment: Exam: 100%**Bibliographic references**

1. Theodore L. Brown ... [et al.] (12th Edition, 2012), Chemistry: the central science
2. Dana Ferris & John S. Hedgcock (3rd Edition, 2013), Teaching ESL Composition
3. Scott L. Montgomery (2nd Edition, 2017), The Chicago Guide to Communicating Science

Semestre: 1**Unité d'enseignement: UET1-M1S1****Matière 1: Rédaction Académique****VHS :22h30 (Cours: 1h30)****Crédits: 1****Objectifs de l'enseignement:**

A travers l'enseignement de ce cours, il est souhaité que l'étudiant puisse apprendre l'art de la rédaction de mémoire de fin d'étude, de publication, de posters, de courriers officiels, et autres documents importants liés à sa formation ainsi qu'à sa vie professionnelle. Un autre objectif visé à travers ce cours est la maîtrise de présentations orales, visant à préparer l'étudiant à une soutenance, ou à offrir une communication orale publique. Un dernier objectif est la formation de l'étudiant à rechercher et préparer un projet de recherche complet.

Connaissances préalables recommandées :

Maîtrise de la langue française, et de la langue anglaise. La maîtrise d'outils open-sources est souhaitable aussi, mais pas obligatoire.

Contenu de la matière:**Chapitre 1 : Introduction à la rédaction académique****(2 semaines)**

- I.1. Pourquoi la recherche
- I.2. Types de rédaction académique
- I.3. Le format à suivre.

Chapitre 2 : Sources à utiliser**(1 semaine)**

- II.1. Textes académiques
 - II.1.1. Revues scientifiques
 - II.1.2. Livres académiques
- II.2. Catalogues
- II.3. Sitewebs.
- II.4. Autres sources

Chapitre 3 : Développer des approches critiques**(2 semaines)**

- III.1. Méthodes de lecture, titres, sous-titres, résumés.
- III.2. Faits et opinions
- III.3. Evaluation des sources internet.
- III.4. Raisonnement critique.

Chapitre 4 : Le plagiat**(1 semaine)**

- IV.1. Comprendre le plagiat
- IV.2. Reconnaissance des sources.
- IV.3. Degrés de plagiat
- IV.4. Techniques pour éviter le plagiat

Chapitre 5 : De la reconnaissance du titre à la planification**(2 semaines)**

- V.1. Le processus de planification
- V.2. L'analyse des titres dans les essais.
- V.3. La réflexion
- V.4. Premières bases de rédaction

Chapitre 6 : Identification de mots-clés et le développement autour**(1 semaine)**

- VI.1. Comment trouver les points-clés et les mots-clés
- VI.2. Comment prendre des notes, et comment les organiser
- VI.3. L'art de résumer des documents
- VI.4. Paraphraser autrui.

Chapitre 7 : Les citations et les références**(1 semaine)**

- VII.1. Les systèmes de référence
- VII.2. Techniques de citation correcte.

Chapitre 8 : L'organisation du texte

(1 semaine)

- VIII.1. L'organisation des paragraphes
- VIII.2. L'introduction et la conclusion
- VIII.3. La vérification

Chapitre 9 : La présentation orale

(1 semaine)

- IX.1. Techniques pour une bonne présentation orale
- IX.2. Préparation psychologique
- IX.3. Découvrir et maîtriser son audience.
- IX.4. Erreurs à éviter.

Mode d'évaluation : Examen final : 100%

Références bibliographiques :

1. *Academic Writing; A handbook for International Students. Routledge Publishing. 4th Ed. 2015*
2. *Writing Research Papers. A complete Guide. Pearson Publishing. 14th Ed. 2012.*
3. *Academic Writing; A handbook for International Students. Routledge Publishing. 4th Ed. 2015.*
4. *Writing Research Papers. A complete Guide. Pearson Publishing. 14th Ed. 2012.*
5. *A Manual for Writers of Research papers, theses, and dissertations. The University of Chicago Press. 8th Ed. 2013.*
6. *Technical Writing 101. Scriptorium Publishing Services, Inc. 2009.*
7. *Teaching and Researching Writing. Pearson Education Limited. 2009*
8. *Technical Writing A-Z. A commonsense Guide to Engineering Reports and Theses. US Ed. ASME Press. 2005.*

Semestre: 1**Unité d'enseignement: UET1-M1S1****Matière 1: Recherche bibliographique****VHS :22h30 (Cours: 1h30)**

Objectifs de l'enseignement (*Décrire ce que l'étudiant est censé avoir acquis comme compétences après le succès à cette matière – maximum 3 lignes*).

Ce cours a comme objectifs de permettre à l'étudiant de :

- Maîtriser des connaissances de base requises pour effectuer un travail de recherche documentaire
- Savoir mener une recherche bibliographique dans une bibliothèque
- Savoir lire et résumer un article scientifique
- Savoir rédiger un article scientifique
- Savoir préparer et présenter un exposé oral.
- Connaître les normes de rédaction d'un mémoire / rapport scientifique
- Savoir écrire une référence bibliographique

Connaissances préalables recommandées (*descriptif succinct des connaissances requises pour pouvoir suivre cet enseignement – Maximum 2 lignes*).

Contenu de la matière :

- Prise de notes.
- Détails des étapes de la recherche bibliographique.
- Écriture des références bibliographiques (des différents documents consultés au cours de la réalisation d'une recherche).
- Étude de la monographie par comparaison avec la conception d'un mémoire.
- La note bibliographique.
- Travail de corrections de la forme sur mémoires soutenus.
- Articulations d'un texte.
- Exposé oral.
- Gestion du temps dans la réalisation d'un mémoire.

Mode d'évaluation : 60% Examen + 40% Continu

Références Livres et photocopiés, sites internet, etc.

Bibliothèques : traitement, catalogue, conservation des livres et des documents.

Institut Pédagogique National, 2^{ème} éd. Revue, 1965, D. CHASSE, et G. WHITNEY,

Guide de rédaction des références bibliographiques.

Ed. Ecole polytechnique de Montréal, 1997, 160p. ISBN 2-553-00628-4, M. GABAY

La prise de notes.

Ed. Librairie Larousse, 1988, 415p. ISBN 2-03-730019-0, G. PELLET,

La prise de notes : pratique d'étudiants universitaires.

Ed. Genève, 2005, 215p. J-C. ROUYEYRAN

Mémoires et thèses. L'art et les méthodes.

Ed. Maisonneuve et Larose, France, 1989, 197p. M-F. SUCH, et D. PEROL

Initiation à la bibliographie scientifique.

Promodis. Ed. du cercle de la librairie. 1987

M1

SEMESTRE 2

Semestre: 2

Unité d'enseignement: UEF1-M1S2

Matière 1: Chimie Quantique Avancée 2

VHS: 67h30 (Cours: 3h00, TD: 1h30)

Objectifs de l'enseignement : *Cette matière permettra à l'étudiant de se familiariser avec le fondement théorique et le formalisme des méthodes de la chimie quantique semi-empiriques et DFT et méthodes composées.*

Connaissances préalables recommandées : *Notions de base en mécanique quantique et chimie quantique acquises en licence et chimie quantique avancée 1 (M1S1).*

Contenu de la matière :

1. Méthodes semi-empiriques

(5 semaines)

- 1.1. Nécessité des méthodes semi-empiriques
- 1.2. Méthode de Huckel étendue (EHT)
- 1.3. Analyse de populations de Mulliken et NBO
- 1.4. Approximation NDO (Neglect of Differential Overlap)
- 1.5. Méthode CNDO (Complete NDO)
- 1.6. Méthode INDO (intermediate NDO)
- 1.7. Approximation NDDO NDO (Neglect of Diatomic Differential Overlap)
- 1.8. Méthode MINDO/3 (Modified INDO /version 3)
- 1.9. Méthode MNDO (Modified Neglect of Diatomic Differential Overlap)
- 1.10. Méthode AM1 (Austin Model 1)
- 1.11. Méthode PM3 (Parametric Method /3)
- 1.12. Méthode PM6 (Parametric Method /6)
- 1.13. Programmes des calculs quantiques semi-empiriques

2- Méthodes de la Théorie de fonctionnelle de densité DFT

(5 semaines)

- 2.1. Différence entre fonction et fonctionnelle
- 2.2. Premier Théorème de Kohn et Hohenberg (fonctionnelle de la densité électronique)
- 2.3. Deuxième théorème de Kohn et Hohenberg (principe variationnel)
- 2.4. Méthode de Kohn et Sham (système fictif et système réel)
- 2.5. Equations de Kohn et Sham
- 2.6. Approximation de la densité locale LDA (Local Density Approximation)
- 2.7. Approximation du gradient généralisé GGA (Gradient Generalized Approximation)
- 2.8. Fonctionnelles DFT hybrides (Exemple : B3LYP)
- 2.9. Fonctionnelles meta GGA
- 2.10. Le passé et le futur de la DFT

3- Méthodes DFT dépendant du temps TD-DFT

(3 semaines)

- 3.1. Principe
- 3.2. Formalisme théorique
- 3.3. Applications

4. Méthodes composées pour le calcul précis de l'énergie

(2 semaines)

- 4.1. Méthodes G1 5 (Gaussian 1), G2 (Gaussian 2) et G3 (Gaussian 3)
- 4.2. Méthodes CBS (complete basis set) : CBS-Q, CBS-4, CBS-QB3

Références bibliographiques :

- Ira N. Levine, *"Quantum Chemistry"*, 7th Edition, Pearson (2014).
- Christopher J. Cramer, *"Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models"*, 2nd Edition, Wiley (2004).
- Frank Jensen, *"Introduction to computational Chemistry"*, Wiley (1999)
- A. R. Leach, *"Molecular Modelling, Principles and Applications"*, Prentice Hall (1996)

Semestre: 2

Unité d'enseignement: UEF1-M1S2

Matière 1: Spectroscopie moléculaire Avancée 2

VHS: 45h00 (Cours: 1h30, TD: 1h30)

Objectifs de l'enseignement (Décrire ce que l'étudiant est censé avoir acquis comme compétences après le succès à cette matière – maximum 3 lignes).

Acquisition des bases théoriques de la spectroscopie électronique et de la photochimie modernes. Appréhension des principes régissant la réactivité des états excités moléculaires et celle des solides sous irradiation. Présentation des grandes classes de processus photochimiques naturels et industriels

Connaissances préalables recommandées (descriptif succinct des connaissances requises pour pouvoir suivre cet enseignement – Maximum 2 lignes).

Contenu de la matière :

Chapitre 1: Introduction générale (1 semaine)

- Historique de la spectroscopie électronique
- Interaction rayonnement-matière : excitation électronique

Chapitre 2 : Molécules diatomiques (3 semaine)

- Classification des états électroniques (notations term-symbol)
- Configurations électroniques moléculaires
- Cas des molécules homonucléaires vs hétéronucléaires
- Règles de sélection électroniques
- Types de transitions électroniques ($\pi \rightarrow \pi^*$, $n \rightarrow \pi^*$, $\sigma \rightarrow \sigma^*$, etc.)
- Structure vibrationnelle des transitions (règle de Franck-Condon)

Chapitre 3 : Transitions d-d et complexes de coordination (3 semaine)

- Règles de sélection
- Couplage spin-orbite et vibronique
- Influence du champ de ligand (variation de Dq , champ faible/fort)

- Abaissement de symétrie et effet Jahn-Teller
- Largeur et intensité des bandes d'absorption (mécanismes d'élargissement)

Chapitre 3 : Molécules polyatomiques et spectres d'absorption (3 semaine)

A. Absorption UV-Visible

- Types de transitions dans les systèmes conjugués
- Influence des orbitales moléculaires sur les spectres
- Contribution vibrationnelle (règle de Franck-Condon)
- Identification des groupes chromophores

B. Conjugaison et effets électroniques

- Allongement du système π : décalage bathochrome
- Effet inductif et mésomère sur les spectres

Chapitre 4 : Fluorescence et phosphorescence (2 semaine)

- Diagramme de Jablonski : états singulet et triplet
- Déplacement de Stokes et structure fine des bandes d'émission
- Règle de l'image miroir (absorption vs émission)
- Durées de vie des états excités
- Rendement quantique de fluorescence/phosphorescence
- Quenching et transfert d'énergie (ex : FRET, PET)

Chapitre 5 : Instrumentation spectroscopique (1 semaine)

- Domaines spectraux : UV, visible, NIR
- Sources lumineuses et détecteurs
- Monochromateurs, cellules, cuves
- Techniques : spectrophotomètre à faisceau simple, double faisceau, à diode array
- Techniques d'émission : fluorimètre, spectromètre de phosphorescence

Chapitre 6 : Introduction à la photochimie (2 semaine)

- Définitions fondamentales
- Réactivité des états excités
- Réactions photochimiques types : photooxydation, photocyclisation, photodécomposition
- Processus naturels (photosynthèse, vision, photolyse de l'ozone)
- Loi de Grotthuss-Draper, rendement quantique photochimique
- Diagramme de Jablonski
- Applications industrielles (photopolymérisation, photothérapie, photovoltaïque)

Mode d'évaluation : 67% Examen + 33% Continu

Références

J. Michl, V. Bonačić-Koutecký, Electronic Spectroscopy of Molecules, Wiley, 1995.

P. F. Bernath, Spectra of Atoms and Molecules, 3rd Edition, Oxford University Press, 2016.
J. R. Lakowicz, Principles of Fluorescence Spectroscopy, 3rd Edition, Springer, 2006.
B. N. Figgis, M. A. Hitchman, Ligand Field Theory and Its Applications, Wiley-VCH, 2000.

Semestre: 2

Unité d'enseignement: UEF2-M1S2

Matière 1: Dynamique Moléculaire

VHS: 45h00 (Cours: 1h30, TD: 1h30)

Objectifs de l'enseignement:

L'enseignement vise à initier les étudiants aux principes fondamentaux et aux outils de la dynamique moléculaire, depuis la mise en place des simulations jusqu'à l'analyse des trajectoires.

Connaissances préalables recommandées: Cet enseignement est nouveau et ne figure pas dans le cursus de la licence

Contenu de la matière:

Chapitre I : Introduction à la dynamique moléculaire (1 semaine)

1. Définition et objectifs
2. Positionnement par rapport à la mécanique moléculaire et à la chimie quantique
3. Applications (biologie structurale, matériaux, interfaces, solvants...)

Chapitre II : Fondements théoriques et méthodes d'intégration (4 semaines)

1. Lois du mouvement de Newton appliquées aux systèmes atomiques
2. Energie cinétique, potentielle et totale
3. Notions de micro-états, trajectoires et espace des phases
4. Algorithmes de base : Verlet, Velocity-Verlet, Leapfrog
5. Choix du pas de temps
6. Conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement

Chapitre III : Conditions de simulation et contrôle des paramètres thermodynamiques (3 semaines)

1. Conditions aux limites périodiques (PBC)
2. Boîtes de simulation : cubique, octaédrique, etc.
3. Coupures de potentiel (cut-off) et méthodes d'images
4. Environnements de simulation : NVE, NVT, NPT
5. Thermostats : Berendsen, Nose-Hoover, Langevin
6. Barostats : Berendsen, Parrinello-Rahman

Chapitre IV : Mise en œuvre d'une simulation dynamique moléculaire (3 semaines)

1. Préparation du système

- a. Paramétrisation (choix du champ de force)
- b. Minimisation d'énergie préalable
- c. Équilibrage (stabilisation des grandeurs physiques)

2. Analyse des trajectoires

- a. Propriétés structurales : RMSD, rayon de giration, distances interatomiques
- b. Propriétés thermodynamiques : température, énergie potentielle, pression

- c. Suivi du comportement d'un ligand ou d'un site actif
- d. Visualisation avec VMD, PyMOL, etc.

Chapitre V : Limites, erreurs et perspectives (2 semaines)

1. Durée de simulation, temps de corrélation
2. Qualité des champs de force et des paramètres initiaux
3. Vers les simulations avancées : QM/MM, dynamiques *accélérées*, MD à champ contraint

Chapitre VI : Dynamique moléculaire vs Méthode de Monte Carlo (2 semaines)

1. Principes de base de la méthode de Monte Carlo
2. Différences conceptuelles : approche déterministe (DM) vs approche stochastique (MC)
3. Échantillonnage de l'espace des phases : trajectoires continues vs tirages aléatoires.

Chapitre VII : Dynamique moléculaire quantique

Mode d'évaluation: Contrôle continu 33% ; Examen final : 67 %.

Références bibliographiques :

- Rapaport, D. C., The Art of Molecular Dynamics Simulation, Cambridge University Press, 2004 (2e édition).
- Tuckerman, M. E., Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation, Oxford University Press, 2010.
- Leach, A. R., Molecular Modelling: Principles and Applications, Pearson Education, 2001 (2e édition).
- Haile, J. M., Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods, Wiley-Interscience, 1992.
- Allen, M. P. & Tildesley, D. J., Computer Simulation of Liquids, Oxford University Press, 2017 (2e édition).

Semestre: 2

Unité d'enseignement: UEF2-M1S2

Matière 1: Interactions moléculaires et DFT conceptuelle

VHS: 45h00 (Cours: 1h30, TD: 1h30)

Objectifs de l'enseignement (*Décrire ce que l'étudiant est censé avoir acquis comme compétences après le succès à cette matière – maximum 3 lignes*).

L'objectif visé par cet enseignement est d'acquérir des connaissances théoriques sur les interactions covalentes et non covalentes. Il s'agit notamment d'utiliser les modèles de Heitler-London et de Hund-Mulliken pour comprendre les liaisons chimiques, en particulier dans la molécule H_2 , ainsi que les bases théoriques des interactions moléculaires à longue distance (forces électrostatiques, de polarisation, de dispersion) et à courte distance (transfert de charge, forces d'exclusion de Pauli).

Connaissances préalables recommandées (*descriptif succinct des connaissances requises pour pouvoir suivre cet enseignement – Maximum 2 lignes*).

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Introduction générale (1 semaine)

- Origines des interactions intermoléculaires
- Classification des interactions intermoléculaires

Chapitre 2 : Etude de la liaison chimique de la molécule H_2 (3 semaine)

- Méthode de la mésomérie.
- Méthode des orbitales moléculaires

Chapitre 3 : Etude des interactions moléculaires à longue distance. (2 semaine)

- Forces électrostatiques.
- Forces de polarisation.
- Forces de dispersion.

Chapitre 4 : Etude des interactions moléculaires à courte distance. (2 semaine)

- Forces par transfert de charge.
- Forces de répulsion
- Liaison hydrogène.

Chapitre 4. Principe HSAB (*Hard and Soft Acids and Bases*) global (2 semaines)

- Considérations expérimentales
- Formulation du principe HSAB
- Concepts chimiques de réactivité résultant du principe HSAB
- Principe de la dureté maximale MHP

Chapitre 5. Concepts chimiques et indices de réactivité dérivant de la DFT conceptuelle (2 semaines)

- Indices globaux dérivant de la DFT
- Indices locaux de réactivité dérivant de la DFT conceptuelle
- Modèles polaires pour l'étude des interactions électrophile-nucléophile
- Descripteur Dual de sélectivité
- Théorie MEDT

Chapitre 6. Analyse topologique de la densité électronique appliquée à la réactivité chimique (3 semaines)

- Théorie des atomes dans les molécules (QTAIM)
- Analyse topologique de la fonction de localisation électronique (ELF)
- Analyse des interactions non-covalentes (NCI)

Mode d'évaluation: Contrôles continus: 33% ; **Examen final : 67%**

Références bibliographiques :

- Parr, R. G., & Yang, W., *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford University Press, 1989.
- Geerlings, P., De Proft, F., & Langenaeker, W., *Conceptual Density Functional Theory*, Chemical Reviews, 2003.
- Chattaraj, P. K. (Ed.), *Chemical Reactivity Theory: A Density Functional View*, CRC Press, 2009.
- Parr, R. G., Szentpály, L. V., & Liu, S. *Electrophilicity Index*, J. Am. Chem. Soc. 1999.
- De Proft, F., Geerlings, P. *Conceptual and Computational DFT in the Study of Aromaticity*, Chem. Rev. 2001.
- Domingo, L. R. *A New CDFT-Based Theoretical Approach to Organic Reactivity: The Molecular Electron Density Theory (MEDT)*, Molecules 2016.
- A.J. Stone, *The Theory of Intermolecular Force*, Clarendon Press, 1997
- Alain Gerschel, *Liaisons intermoléculaires : Les forces en jeu dans la matière condensée*, EDP SCIENCES, Broché – 2000
- Henry Margenau, *Theory of intermolecular forces*, 1969.

Semestre: 2**Unité d'enseignement: UEM1-M1S2****Matière 1: TP chimie quantique avancée 2****VHS: 15h00 (TP: 1h00)****Objectifs de l'enseignement:**

Les TP de chimie quantique avancée 1 moléculaire ont pour objectif l'apprentissage d'utiliser les programmes de calculs quato-chimiques. Chaque TP contient une série d'exercices pratiques.

Connaissances préalables recommandées:

Cet enseignement est nouveau et ne figure pas dans le cursus de la licence

Contenu de la matière:

TP N°01 : Calculs semi-empiriques avec le logiciel HyperChem (2 semaines)

TP N°02 : Calculs semi-empiriques avec le logiciel AMPAC (2 semaines)

TP N°03 : Calculs semi-empiriques avec les logiciels Gaussian/GaussView (2 semaines)

TP N°04 : Calculs DFT avec le logiciel HyperChem (2 semaines)

TP N°05 : Calculs DFT avec les logiciels Gaussian/GaussView sous windows (3 semaines)

TP N°06 : Calculs DFT avec le logiciel Gaussian sous LINUX (2 semaines)

TP N°07 : Calculs DFT avec le logiciel ORCA (2 semaines)

Mode d'évaluation: Contrôles continus : 100%

Références bibliographiques :

- <http://www.hypercubeusa.com>.
- <https://www.ampaonline.org>
- <https://www.schrodinger.com/documentation>
- <https://www.gaussian.com>
- <https://gaussian.com/gaussview6/>
- <https://www.faccts.de/orca/>

Semestre: 2

Unité d'enseignement: UEM2-M1S2

Matière 1: Statistiques, analyse de données et chimiométrie

VHS: 37h30 (Cours: 1h30, TP: 1h00)

Objectifs de l'enseignement

Initiation à la méthodologie de la recherche et l'utilisation des plans d'expériences ainsi que les traitements statistiques dédiés à la validation des méthodes d'analyse et à l'estimation de la robustesse des méthodes d'analyse.

Connaissances préalables recommandées

L'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du tronc commun et de la licence.

Contenu de la matière :

Chapitre I : Notions d'incertitudes Expérimentales (2 semaines)

- L'erreur et incertitude
- Origine des erreurs
- Présentation d'un résultat
- Propagation des erreurs
- Détection et Minimisation des erreurs
- Chiffres significatifs

Chapitre II : Validation des Méthodes d'Analyses (3 semaines)

- Description d'une méthode d'analyse
- Classification des méthodes
- Performances et critères de choix
- Calculs statistiques de validation
- Notion d'incertitude de mesure
- Applications pratiques

Chapitre III : Statistiques des Mesures Expérimentales (2 semaines)

- Moyenne et écart-type
- Variance et coefficient de variation
- Distribution des mesures
- Limites et intervalles de confiance

Chapitre IV: Régression linéaire simple (RLS) (2 semaines)

- Méthode d'estimation des coefficients de régression
- Critère des Moindres Carrés Ordinaires » (MCO, Ordinary Least Squares)
- Hypothèses de l'analyse de régression linéaire
- Loi normale
- Qualité de la régression linéaire
- Exemples de régression linéaire simple

Chapitre V : Régression linéaire multiple (MLR) (2 semaines)

- Présentation matricielle
- Matrice variance-covariance
- Matrice inverse
- Estimation des coefficients de régression
 - Estimation des paramètres statistiques du modèle

- Tests sur le modèle linéaire
 - Test de la signification globale de la régression (F-Fisher)
 - Test de signification de chaque paramètre (chaque descripteur) t-Student
 - Critères de comparaison de modèle Coefficient de détermination ajusté R^2
 - Critère de validation croisée
 - Exemples de régression linéaire multiple
 - Multicolinéarité dans la régression

Chapitre VI : Régression aux moindres carrés partiels (PLS) (2 semaines)

- Construction de la première composante
- Critère de choix du nombre de composantes
- Exemples de régression PLS

Chapitre VII : Analyse en composantes principales (PCA) (2 semaines)

- Matrice de variance-covariance et matrice de corrélation.
- Diagonalisation, valeurs propres et vecteurs propres.
- Interprétation géométrique
- Inertie totale et inertie expliquée.
- Exemples de PCA

Mode d'évaluation : continu et examen

Références :

- J. Goupy, Introduction aux Plans d'Expériences, édition Dunod, 2013.
- M. Feinberg, Labo-Stat : guide validation des méthodes d'analyse, édition Lavoisier Tec&Doc, 2009.
- Richard G. Brereton, Chemometrics Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant, Éditeur: Wiley, 2003.
- Ducauze Christian, Chimie analytique, analyse chimique et chimiométrie : Concepts, démarche et méthodes, Éditeur : Lavoisier, 2014.
- Mme Hamida S., Polycopié de cours : Cours et exercices de chimiometrie, Université des Sciences et de la Technologie d'Oran -Mohamed Boudiaf, 2019.

Semestre: 2**Unité d'enseignement: UEM1-M1S2****Matière 1: TP Dynamique Moléculaire****VHS: 15h00 (TP: 1h00)****Objectifs de l'enseignement:**

Les travaux pratiques visent à initier les étudiants à la mise en œuvre complète d'une simulation de dynamique moléculaire, depuis la préparation du système jusqu'à l'analyse des résultats. Ils permettent également de manipuler des outils professionnels et d'interpréter les trajectoires obtenues.

Connaissances préalables recommandées:

Cet enseignement est nouveau et ne figure pas dans le cursus de la licence

Contenu de la matière:

TP1: Préparation et Simulation DM d'une Protéine Modèle en solvant explicite/implicite avec le logiciel Schrödinger /Desmond/Maestro. **(2 semaines)**

TP2: Préparation et Simulation DM d'une Protéine Modèle en solvant implicite/implicite avec le logiciel Gromacs/Maestro. **(2 semaines)**

TP3 : Analyse de la stabilité d'un complexe médicament-récepteur par DM à l'aide du logiciel Desmond/Maestro. **(2 semaines)**

TP4 : Analyse de la stabilité d'un complexe médicament-récepteur par DM à l'aide du logiciel Gromacs/Maestro. **(2 semaines)**

TP5 : Étude de la réactivité chimique avec la DM avec Desmond et Gromacs. **(3 semaines)**

TP6 : Analyse conformationnelle par une simulation Monte Carlo avec le logiciel Schrödinger/MacroModel/Maestro. **(2 semaines)**

Mode d'évaluation: **Contrôles continus: 100%**

Références bibliographiques :

- <https://www.schrodinger.com/documentation>
- <https://www.schrodinger.com/tutorials>
- <http://www.gromacs.org/Documentation>

<http://www.gromacs.org/Documentation/Tutorials>

Semestre: 2

Unité d'enseignement: UEM1-M1S2

Matière : Intelligence artificielle et Machine Learning 2

Objectifs du cours :

S'appuyer sur les techniques de base de l'apprentissage automatique (Machine Learning) pour introduire l'apprentissage profond, les réseaux neuronaux et les concepts avancés d'apprentissage automatique pour les applications en sciences de la matière. Les étudiants approfondiront leur compréhension de la découverte et de la conception de matériaux basées sur l'IA.

Contenu du cours :

- **Chapitre 1 : Modèles basés sur les graphes dans les sciences de la matière**
 - Les matériaux sont des graphes : atomes = nœuds, liaisons = arêtes.
 - Réseaux convolutionnels de graphes de cristaux (CGCNN).
 - Étude de cas : Prédiction des énergies de formation.
- **Chapitre 2 : Modèles génératifs pour la conception de matériaux**
 - Introduction aux réseaux adversariels génératifs (GAN) et aux auto-encodeurs variationnels (VAE).
 - Application : Conception de nouveaux matériaux et molécules.
- **Chapitre 3 : Évaluation des modèles et interprétabilité**
 - Techniques d'évaluation des modèles d'apprentissage profond : validation croisée, surajustement.
 - Interprétation des modèles avec SHAP et LIME.
- **Chapitre 4 : Techniques avancées de ML**
 - Modèles d'ensemble (Random Forests, XGBoost, LightGBM).
 - Modèles avancés de régression et de classification.
 - Réduction de la dimensionnalité : ACP, t-SNE, UMAP.
- **Chapitre 5 : Applications avancées en sciences de la matière**
 - Conception inverse pour la découverte de matériaux à l'aide de l'IA.
 - Prédiction des propriétés des matériaux (modules élastiques, supraconductivité, etc.).
 - Modélisation multi-échelle : combinaison de l'IA avec la dynamique moléculaire ou la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).
- **Chapitre 6 : Mini-Projet de spécialisation (Capstone Project)**

Les étudiants réaliseront un projet dans lequel ils appliqueront l'IA/ML pour résoudre un problème en sciences de la matière, en utilisant les compétences acquises tout au long du semestre.

Outils et bibliothèques :

- Python, Jupyter Notebooks
- TensorFlow, PyTorch
- Matminer, Pymatgen

Bibliographie :

- *"Deep Learning" by Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, and Aaron Courville (a comprehensive introduction to deep learning)*
- *"Deep Learning with Python" by François Chollet (applies Keras for hands-on deep learning projects)*
- *"Machine Learning for Materials Science" by Jha et al. (directly relates to AI in materials science)*

- *"Data Science for Materials Discovery"* by K. A. Persson, et al. (focused on machine learning applications in materials science)
- *"Materials Informatics: Methods, Tools, and Applications"* by Rajiv S. Mishra (further extends ML into material discovery)

Semestre: 2

Unité d'enseignement: UED1-M1S2

Matière 1: Chimie organique 2

VHS: 22h30 (Cours: 1h30)

Objectifs de l'enseignement:

Cette matière permet aux étudiants de passer en revues les réactions de Chimie Organiques les plus importantes et les plus étudiées. Plusieurs approches peuvent être envisagées. Les réactions sont classées par ordre alphabétique de leurs auteurs.

Connaissances préalables recommandées:

La chimie Organique descriptive S4 / L2, ainsi que le S5 / L3 sont prérequis pour une meilleure compréhension du cours et des applications qui sont afférentes.

Contenu de la matière:

Chapitre I : Réactions de Cycloadditions et réactions Péricyclique: (2 semaines)

I.1. Réaction de DIELS-ALDER et Réaction d'hétéro DIELS-ALDER avec les différentes variantes

I.2. Réaction de cycloaddition 1,3-dipolaire (Réaction de Huisgen)

Chapitre II : Composés Aromatiques : (2 semaines)

II.1. Substitutions nucléophiles aromatiques

II.2. Réaction de KOLBE

II.3. Réaction de REIMER TEIMAN

II.4. Réaction de diazotation

Chapitre III : Alcools, Ethers-oxydes et Phénols (2 semaines)

III.1. Réarrangement de CLAISEN

III.2. Epoxydes (époxydation de SARPLESS)

III.3. Oxydation par le réactif de DESS-MARTIN

Chapitre IV : Amines (2 semaines)

IV.1. Réarrangement divers (HOFFMANN, CURTIUS, SCHIMDT)

IV.2. Réaction de MANNICH

IV.3. Réaction de GABRIEL

IV.4. Réaction de STAUDINGER

Chapitre V : Aldéhydes et Cétones (2 semaines)

V.1. Aldolisation et Cétolisation – Réaction de KNOEVENAGEL

V.2. Annellation de ROBINSON

V.3. Synthèse d'acyloïne

V.4. Réaction de WITTIG et Variantes

- V.5. Réaction de WOLF-KISHNER
- V.6. Synthèse d'Aldol de MUKAIYAMA
- V.7. Réduction de MERWEIN-VERLEY-PONDORF
- V.8. Réaction de BAYLLIS-HILMANN
- V.9. Réaction de SHAPIRO

Chapitre VI : Acides Carboxyliques et dérivés d'Acides (3 semaines)

VI.1. Décarboxylations (décarboxylations de KRAPCHAU, Réduction de BARTON-MOTHERWELL)

VI.2. Nitriles (réaction de HELL-VOLHARTD-ZELINSKY, Condensation de DIECKMANN,

VI.3. Composés à Méthylènes Actifs, Réaction de DARZENS, Synthèse Malonique

Chapitre VII : Transposition divers (2 semaines)

- V.1. Transposition de BECKMAN
- V.2. Réarrangement de BAKER-VENKATARAMAN
- V.3. Réarrangements de CLAISEN/ IRELAND et COPE
- V.4. Réarrangement de FRIES

Mode d'évaluation: Contrôle continu: 100%

Références bibliographiques :

- 1- « Chimie organique » (Allinger) Tome 1, 2 et 3
- 2- Base de Données « REAXYS »
- 3- « MARCH'S ADVANCED ORGANIC CHEMISTRY » Sixth ed.
M.B. SMITH and Jerry MARCH Ed. WILEY INTERSCIENCE).

Semestre: 2

Unité d'enseignement: UED1-M1S2

Matière 1: Phytochimie

VHS: 22h30 (Cours: 1h30)

Objectifs de l'enseignement:

Cette matière forme à l'étude scientifique des composés végétaux, depuis leur extraction (méthodes classiques et innovantes) jusqu'à leur caractérisation (techniques analytiques) et modélisation (outils bioinformatiques), en vue de leurs applications pharmaceutiques, cosmétiques et agroalimentaires.

Connaissances préalables recommandées:

Une base en chimie organique (fonctions chimiques, réactivité) et en biochimie (métabolisme primaire/secondaire) est essentielle, ainsi que des notions de techniques analytiques (spectroscopie, chromatographie). Une familiarité avec les outils informatiques de modélisation moléculaire serait un atout.

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Introduction à la phytochimie (2 semaines)

- Définition et historique
- Importance des composés phytochimiques dans l'industrie pharmaceutique, cosmétique, et agroalimentaire.

Chapitre 2 : Méthodes d'extraction et d'isolement (2 semaines)

- Techniques classiques : macération, Soxhlet, hydrodistillation
- Méthodes modernes : extraction assistée par ultrasons, micro-ondes, CO₂ supercritique

Chapitre 3 : Principales classes de composés phytochimiques (2 semaines)

- Composés phénoliques, terpènes, alcaloïdes et saponines

Chapitre 4 : Méthodes d'analyse et d'identification (2 semaines)

- Techniques spectroscopiques : UV-Vis, IR, RMN, MS
- Chromatographie : CPG, HPLC, CCM

Chapitre 5 : Phytochimie et modélisation moléculaire (2 semaines)

- Bases de données phytochimiques (PubChem, NPASS, TCMID...)
- Principes de pharmacophore, docking moléculaire, et analyse des interactions ligand-cible

Chapitre 6 : Prédiction des propriétés pharmacocinétiques et toxicologiques (2 semaines)

- Propriétés pharmacocinétiques et toxicologiques
- Introduction aux outils de prédiction ADMET (SwissADME, pkCSM, admetSAR)

Mode d'évaluation : examen

Références

Sarker, S. D., & Nahar, L. (Eds.). (2024). *Computational phytochemistry*. Elsevier.

Egbuna, C., Ifemeje, J. C., Udedi, S. C., & Kumar, S. (Eds.). (2018). *Phytochemistry: Volume 1: Fundamentals, Modern Techniques, and Applications*. CRC Press.

Semestre: 2

Unité d'enseignement: UED1-M1S2

Matière 1: Chromatographie

VHS: 22h30 (Cours: 1h30)

Objectifs de l'enseignement (Décrire ce que l'étudiant est censé avoir acquis comme compétences après le succès à cette matière – maximum 3 lignes).

Acquérir les compétences nécessaires pour maîtriser les techniques de la chromatographie.

Connaissances préalables recommandées (*descriptif succinct des connaissances requises pour pouvoir suivre cet enseignement – Maximum 2 lignes*).

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Généralités (2 semaines)

- a. Phénomènes mis en jeu
- b. Classification des méthodes
- c. Description des nouvelles méthodes chromatographiques (UPLC, SFC, GC 2D, LC 2D).

Chapitre 2 : Mesures physico-chimiques possibles (4 semaines)

- a. En CPG
 - i. Transition de phases dans le corps pur
 - 1. Transition
 - 2. Fusion
 - ii. Grandeurs thermodynamiques de solution
 - 1. Solutions idéales
 - 2. Solutions réelles
 - iii. Grandeurs en chromatographie d'adsorption
 - 1. Isothermes d'adsorption
 - 2. Enthalpies et entropies d'adsorption
- b. En HPLC
 - i. Théorie du partage
 - i. Méthodes de contribution par propriété (LSER par exemple)

Chapitre 3 : Aspects analytiques des méthodes séparatives (4 semaines)

- a. En CPG
 - i. Méthodes prédictives de la rétention
 - ii. Exemples de séparation
- b. En HPLC
 - i. Méthodes prédictives de la rétention
 - ii. Exemples de séparation

Travaux pratiques de chromatographie (5 semaines)

- TP01 : Analyse qualitative : Séparation et identification des constituants d'un mélange
- TP02 : Etude de l'influence du débit de l'éluant sur l'efficacité de la colonne
- TP03 : Etude de l'influence de la teneur en eau sur la force éluante de la phase mobile
- TP04 : Dosage par HPLC d'un principe actif
- TP05 : Etude par CPGI des propriétés thermiques de la phase stationnaire

Mode d'évaluation : 67% Examen + 33% Continu

Références Livres et photocopiés, sites internet, etc.

Chromatography: Fundamentals and Applications of Chromatography
Erich Heftmann, Elsevier 2004

Chromatography: Concepts and Contrasts
James M. Miller, Wiley 2005

Semestre: 2

Unité d'enseignement: UED1-M1S2

Matière 1: Mathématiques appliquées

VHS: 22h30 (Cours: 1h30)

Objectifs de l'enseignement (*Décrire ce que l'étudiant est censé avoir acquis comme compétences après le succès à cette matière – maximum 3 lignes*).

Le but de ce cours est d'apprendre à utiliser certains outils mathématiques d'usage fréquent en chimie / physique et d'acquérir une connaissance opérationnelle.

Connaissances préalables recommandées (*descriptif succinct des connaissances requises pour pouvoir suivre cet enseignement – Maximum 2 lignes*).

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Équations différentielles. (5 semaines)

Équations différentielles du premier ordre : Équations linéaires du premier ordre. Exemples d'étude d'équations différentielles non linéaires du premier ordre. Équations différentielles linéaires du second ordre : Équations linéaires du second ordre à coefficients constants. Exemples d'équations à coefficients non constants.

Chapitre 2 : Systèmes d'équations différentielles. (5 semaines)

Définition, Systèmes différentiels linéaires. Écriture vectorielle et matriciel. Valeurs propres et vecteurs propres. sous espaces propres. Polynôme caractéristique. Résolution du système différentiel.

Chapitre 3 : Étude qualitative de systèmes différentiels non linéaires points d'équilibre et leurs stabilités. (5 semaines)

Mode d'évaluation : 67% Examen + 33% Continu

Références Livres et photocopiés, sites internet, etc.

Semestre: 2

Unité d'enseignement: UET2-M1S2

Matière 1: Exploration de Logiciels Open Source dans la spécialité

VHS: 22h30 (Cours: 1h30)

« Chaque spécialité doit consacrer un créneau afin de faire découvrir aux étudiants un ou plusieurs logiciels libres et open source en lien avec la spécialité concernée. Le choix du logiciel est laissé à l'appréciation de chaque équipe pédagogique, en veillant à ce qu'il réponde au mieux aux besoins spécifiques de la spécialité. »

Objectifs de l'enseignement : Ce cours a pour objectif principal de développer les compétences numériques des étudiants en les formant à l'utilisation d'outils informatiques libres et open source, essentiels dans un environnement professionnel et académique de plus en plus digitalisé. Il vise à leur faire acquérir une maîtrise pratique des logiciels et bases de données open source, afin de répondre aux besoins spécifiques des chercheurs et des laboratoires, notamment dans la résolution de problèmes complexes.

Connaissances préalables recommandées : Une maîtrise des outils informatiques de base (suites bureautiques, logiciels de gestion de projet et plateformes collaboratives) est recommandée pour suivre ce cours dans les meilleures conditions. Ces compétences permettront d'aborder plus efficacement les concepts avancés des logiciels libres et open source.

Contenu de la Matière

1. Introduction aux Logiciels Libres (1 semaines)

- libre vs open source vs propriétaire
- Histoire du mouvement : de Stallman à Linux
- Les 4 libertés fondamentales
- Enjeux éthiques, économiques et sociétaux

2. Tout sur les Licences (2 semaines)

- Les différentes familles de licences (GPL, MIT, Apache)
- Copyleft : principe et importance
- Ce qu'on peut faire ou pas avec chaque licence
- Exemples de projets et leurs licences

3. L'Argent dans le Libre (2 semaines)

- Comment les projets libres gagnent de l'argent
- Le modèle des services payants
- Rôles des entreprises (Red Hat, Canonical, etc.)
- Financement participatif et subventions

4. Outils et Environnements Open Source (2 semaines)

- Panorama des logiciels libres essentiels
- Comparaison avec leurs équivalents propriétaires
- Installation et prise en main d'un OS libre (Linux)
- Découverte des suites bureautiques libres

5. Contribution aux Projets Open Source (2 semaines)

- Fonctionnement d'une communauté open source
- Plateformes de collaboration (GitHub, GitLab)
- Bonnes pratiques pour contribuer (code, documentation, tests)
- Exemple : première contribution

6. Sécurité et Protection (2 semaines)

- Pourquoi les logiciels libres sont plus sûrs
- Outils gratuits pour protéger ses données
- Chiffrement et vie privée
- Études de cas de réussites

7. Le Libre au Travail (2 semaines)

- Avantages pour les entreprises
- Comment migrer depuis des solutions payantes
- Aspects juridiques à connaître
- Exemples de grandes migrations réussies

8. Futur du Libre (2 semaines)

- Les nouvelles tendances (IA, cloud)
- Les défis à relever
- Comment participer à l'avenir du libre
- Synthèse des enjeux clés

Nom	URL
ChemCalc (22 apr 2002)	http://chemcalc.sourceforge.net
Chemeq (22 apr 2002)	ftp://boltz.univ-littoral.fr/pub/chemeq
Chemsuite (03 mar 2002)	http://chemsuite.seul.org
Chemtool (22 apr 2002)	http://ruby.chemie.uni-freiburg.de/~martin/chemtool/chemtool.html
CHIMP (22 apr 2002)	http://chimp.sourceforge.net
DND (22 apr 2002)	http://theopenlab.uml.edu/dnd
Garlic (28 jul 2001)	http://pref.etfos.hr/garlic
GDPC (15 nov 2002)	http://www.physics.helsinki.fi/~frantz/software/gdpc.html
GDIS(15 nov 2002)	http://gdis.seul.org
Gchemical (15 nov 2002)	http://bioinformatics.org/gchemical
GPeriodic (31 may 2002)	http://gperiodic.seul.org
JChemPaint (28 jun 2002)	http://jchempaint.sourceforge.net

JCML (28 jul 2001)	http://www.openscience.org/~egonw/cml
Jmol (4 dec 2001)	http://jmol.sourceforge.net
KC (28 jul 2001)	ftp://fatou.ruc.dk/pub/kneth
Kemistry (04 fev 2003)	http://kemistry.sourceforge.net
KMol (15 nov 2002)	http://www.idiom.com/~tomi/kmol.html
KMovisto (10 fev 2003)	http://members.tripod.de/PageOfMH
Lennard (28 jul 2001)	http://www.ibiblio.org/pub/Linux/science/chemistry
MWCalc (28 jul 2001)	http://savannah.gnu.org/projects/mwcalc/
Moldy (15 nov 2002)	http://www.earth.ox.ac.uk/~keith/moldy.html
MOSCITO (15 nov 2002)	http://ganter.chemie.uni-dortmund.de/MOSCITO/moscito_downl.shtml
MPQC (15 nov 2002)	http://aros.ca.sandia.gov/~cljanss/mpqc/
NanoCAD (28 jul 2001)	http://willware.net:8080/ncad.html
ORAC (20 jun 2002)	http://www.chim.unifi.it:8080/orac/
OSET (28 jul 2001)	http://litio.pquim.unam.mx/caos/
VASP Viewer (28 jul 2001)	http://vaspview.sourceforge.net/
XDrawChem (6 fev 2003)	http://www.prism.gatech.edu/~gte067k/xdrawchem
XMakeMol (4 jun 2002)	http://vegemite.chem.nottingham.ac.uk/~xmakemol
PyMOL (15 nov 2002)	http://pymol.sourceforge.net
BigMAC (16 jan 2002)	http://molsim.chem.uva.nl/bigmac
2D-Numerical (16 jan 2002)	http://staff.csc.fi/~laaksone/Num2d.html
Ballroom (16 jun 2002)	http://www.fisica.uniud.it/~ercolessi/ballroom.html
B (16 jan 2002)	http://www.scripps.edu/~nwhite/Biomer
OpenBabel (6 fev 2002)	http://openbabel.sourceforge.net
PolyXmass (15 nov 2002)	http://www.polyxmass.org
JOELib (17 nov 2002)	http://joelib.sourceforge.net/
Abinit (17 jul 2002)	http://www.abinit.org

Parsemol (30 Jul 2002)	http://www.pansanel.net/linux/mwcalc.html
PWSCF (13 Oct 2002)	http://www.sissa.it/cm/PWcodes
BKchem (15 nov 2002)	http://www.nongnu.org/bkchem/
Kalzium (09 fev 2003)	http://edu.kde.org/kalzium/
Xem (6 fev 2003)	http://www.linux-france.org/prj/xem/
Gromacs (10 fev 2003)	http://www.gromacs.org/

Mode d'évaluation : Contrôles continus 33% + Examen final 67%

Références bibliographiques

- <https://sourceforge.net/directory/chemistry/windows/>
- <https://www.openchemistry.org>
- <https://fsffrance.org/science/chimie.fr.html>
- Williams, Sam. Free as in Freedom: Richard Stallman's Crusade for Free Software. O'Reilly, 2002.
- Stallman, Richard. Richard Stallman et la révolution du logiciel libre. Eyrolles, 2010.
- Mouël, Françoise. L'économie du logiciel libre. CNRS Éditions, 2021.
- APRIL. Guide du logiciel libre en entreprise. 2022, april.org.
- Open Source Initiative. The OSI Licenses Overview. 2023, opensource.org/licenses.

M2

SEMESTRE 3

Semestre: 3

Unité d'enseignement: UEF1-M2S3

Matière 1: Chimie Quantique Avancée 3 (CQA3)

VHS: 67h30 (Cours: 3h00, TD: 1h30)

Objectifs de l'enseignement : *Cette matière permettra à l'étudiant de se familiariser avec le fondement théorique et le formalisme des méthodes avancées de la chimie quantique.*

Connaissances préalables recommandées : *Notions de base en mécanique quantique et chimie quantique acquises en licence et en M1 CTC et Notions de base de Thermodynamique statistique.*

Contenu de la matière :

- 1- Calcul théorique des grandeurs thermochimiques (6 semaines)
 - 1.1. Rappels sur la thermodynamique statistique
 - 1.1. Contribution de la translation
 - 1.2. Contributions du mouvement de rotation
 - 1.3 Contributions du mouvement de vibration
 - 1.4. Contributions du mouvement électronique
 - 1.5. Thermochimie avec le programme **Gaussian**
 - 1.6. Calcul de l'énergie interne, de l'enthalpie et l'enthalpie libre de Gibbs d'une molécule
 - 1.7. Calcul de la variation de l'énergie interne, de l'enthalpie et l'enthalpie libre de Gibbs d'une réaction
 - 1.8. Calcul des vitesses de réactions chimiques
- 2- Méthodes hybrides QM/MM (Quantum Mechanics / Molecular Mechanics) (4 semaines)
 - 2.1. Principe des méthodes QM/MM
 - 2.2. Méthode ONIOM2 et ONIOM3
 - 2.3 Applications
3. Modèles de solvation (5 semaines)
 - 3.1. Introduction
 - 3.2. Solvation explicite
 - 3.3. Solvation implicite (continuum diélectrique)
 - 3.4. Modèle SCRF (Self-Consistent Reaction Field)
 - 3.5. Modèle PCM
 - 3.6 Modèle COSMO
 - 3.7 Modèle SMD

Chapitre 4 : Analyse de population (Modèles de charges partielles)

Chapitre 5 : Potentiel électrostatique moléculaire

Mode d'évaluation : **Contrôles continus : 33% + Examen final 67%**

Références bibliographiques :

- Ira N. Levine, "Quantum Chemistry", 7th Edition, Pearson (2014).
- Christopher J. Cramer, "Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models", 2nd Edition, Wiley (2004).
- Frank Jensen, "Introduction to computational Chemistry, Wiley (1999)
- A. R. Leach, "Molecular Modelling, Principles and Applications, Prentice Hall (1996)

Semestre: 3

Unité d'enseignement: UEF1-M2S3

Matière 1: Thermodynamique statistique (CQA3)

VHS: 45h00 (Cours: 1h30, TD: 1h30)

Objectifs de l'enseignement : Ce cours approfondit la thermodynamique classique et les bases statistiques, en abordant des applications comme les gaz réels et les transitions de phase. Il introduit aussi des méthodes numériques modernes telles que les simulations Monte Carlo et la dynamique moléculaire.

Connaissances préalables recommandées : L'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du premier et deuxième semestre du M1.

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Fondements et Introduction (2 semaines)

1.1 Rappels thermodynamiques

- Lois de la thermodynamique
- Potentiels thermodynamiques
- Limites de l'approche macroscopique

1.2 Principes de base

- Hypothèse ergodique
- Moyennes temporelles vs moyennes d'ensemble
- Échelles de description (micro/macro)

1.3 Notion d'ensemble statistique

- Définition mathématique
- Espace des phases
- Exemples concrets (gaz parfait, solide magnétique)

Chapitre 2 : Théorie des Ensembles (4 semaines)

2.1 Ensemble microcanonique

- Systèmes isolés (N, V, E fixes)
- Définition de l'entropie statistique

2.2 Ensemble canonique

- Fonction de partition Z
- Distribution de Boltzmann
- Énergie libre et grandeurs dérivées

2.3 Ensemble grand-canonique

- Potentiel chimique
- Fonction de partition grand-canonique
- Applications aux systèmes ouverts

2.4 Ensemble isotherme-isobare

- Fonction de partition isobare
- Enthalpie libre
- Exemple des transitions de phase

Chapitre 3 : Applications aux Systèmes Classiques (4 semaines)

3.1 Gaz parfaits classiques

- Théorème d'équipartition
- Distribution de Maxwell-Boltzmann

- Capacité calorifique

3.2 Systèmes dilués réels

- Équation de van der Waals
- Théorie du champ moyen
- Potentiels intermoléculaires

Chapitre 4 : Extension Quantique (2 semaines)

4.1 Fondements quantiques

- Opérateur densité
- Fonction de partition quantique
- Limite classique et correction de Gibbs

4.2 Statistiques quantiques

- Fermions vs Bosons
- Gaz de Fermi parfait (électrons, température de Fermi)
- Gaz de Bose parfait (condensation BEC)

Chapitre 5 : Approches Numériques (3 semaines)

8.1 Méthodes de Monte Carlo

8.2 Dynamique moléculaire

8.3 Applications numériques

Mode d'évaluation : 67% Examen + 33% Continu

Références bibliographiques :

1. Infelta P.; Graetzel M. Thermodynamique : principes et applications, Brown Walker Press, 2006.
2. Nightingale M. P. ; Umrigar C. J., Monte Carlo Methods in Chemistry, Wiley, NY, 1998.
3. Frenkel, D.; Smit, B., Understanding molecular simulations: From algorithms to applications, Academic Press: San Diego, 1996.

Semestre: 3

Unité d'enseignement: UEF1-M2S3

Matière 1: Chimie du solide

VHS: 45h00 (Cours: 1h30, TD: 1h30)

Objectifs de l'enseignement (Décrire ce que l'étudiant est censé avoir acquis comme compétences après le succès à cette matière – maximum 3 lignes).

Ce cours a comme objectifs de permettre à l'étudiant de : Maîtriser des connaissances de base requises pour effectuer des simulations on utilisant abinit des solides.

Connaissances préalables recommandées (descriptif succinct des connaissances requises pour pouvoir suivre cet enseignement – Maximum 2 lignes).

Chapitre 1: Fondements de la mécanique quantique appliquée au solide (1 semaines)

1. Principes de base de la mécanique quantique
2. Quantification de l'énergie et dualité onde-corpuscule
3. Équation de Schrödinger indépendante du temps
4. Notions de fonction d'onde, opérateurs et observables
5. Application aux systèmes périodiques : introduction conceptuelle

Chapitre 2: États de la matière condensée (2 semaines)

1. Solides cristallins vs amorphes
2. Métaux, isolants, semi-conducteurs et supraconducteurs
3. Introduction aux matériaux 2D et hybrides

Chapitre 3: Structure cristalline des solides (2 semaines)

1. Les réseaux de Bravais (classification et symétries)
2. L'empilement atomique et structures cristallines courantes (cubique, hexagonale, etc.)
3. La maille conventionnelle et la maille primitive
4. La construction de la maille de Wigner-Seitz
5. Les paramètres de réseau, densité atomique et compacité
6. Défauts cristallins : lacunes, dislocations et impuretés

Chapitre 4: Diffraction des rayons X et structure cristalline (2 semaines)

1. Principe de la diffraction des RX (condition de Bragg)
2. Construction du réseau réciproque
3. Indices de Miller et plans cristallins
4. Méthodes expérimentales de diffraction (RX, neutrons, électrons)

Chapitre 5: Théorie des liaisons et structure électronique (2 semaines)

1. La liaison covalente entre deux atomes.
2. La liaison covalente dans une chaîne infinie
3. Le théorème de Bloch

4. Diagramme de bandes d'énergie : métaux, isolants, semi-conducteurs
5. Notions de densité d'états (DOS) et de surface de Fermi

Chapitre 6: Propriétés physiques des matériaux solides (2 semaines)

1. Propriétés optiques des solides : absorption, transmission, réfraction
2. Transport électrique et conduction dans les métaux et semi-conducteurs
3. Conductivité thermique et couplage électron-phonon
4. Vibrations dans le solide : phonons, spectre de phonons, chaleur spécifique
5. Propriétés mécaniques : module de Young, dureté, déformation (notions de base)

Chapitre 7: La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) appliquée aux solides (2 semaines)

1. Fondements de la DFT : principes de Hohenberg-Kohn
2. Résolution des équations de Kohn-Sham
3. Approximations pour l'échange-corrélation (LDA, GGA, etc.)
4. Méthodes de calcul dans les solides : bases d'ondes planes, pseudopotentiels
5. Comparaison avec d'autres méthodes de chimie quantique (HF, post-HF)

Chapitre 8: Introduction à la simulation ab initio avec ABINIT (2 semaines)

1. Présentation du code ABINIT : structure et principes de base
2. Préparation des entrées, choix des paramètres et convergence
3. Introduction à la relaxation géométrique et au calcul de phonons
4. Travaux pratiques :
 - Simulation de la molécule H_2 (calcul de l'énergie et de la densité électronique)
 - Simulation du cristal de Si : géométrie, structure de bandes, DOS
 - Simulation du cristal AsGa : propriétés électroniques et comparaison Si/AsGa
 - Visualisation de la densité électronique et des bandes d'énergie

Références

1. "Introduction à la physique du solide" – Charles Kittel (incontournable)
2. "Solid State Physics" – Neil W. Ashcroft & N. David Mermin
3. "Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods" – Richard M. Martin
4. "Density Functional Theory: A Practical Introduction" – David Sholl & Janice A. Steckel

Semestre: 3

Unité d'enseignement: UEF1-M2S3

Matière 1: Modélisation QSPR/QSAR et Docking moléculaire

VHS: 45h00 (Cours: 1h30, TD: 1h30)

Objectifs de l'enseignement:

Cette matière permettra à l'étudiant de se familiariser avec les méthodes de modélisation QSPR/QSAR

Connaissances préalables recommandées:

(Descriptif succinct des connaissances requises pour pouvoir suivre cet enseignement)

Contenu de la matière:

Chapitre I: Modélisation QSPR/QSAR (3 semaines)

- I.1. Introduction à la modélisation QSPR/QSAR
- I.2. Principe des méthodes QSAR/QSPR
- I.3. Méthodologie générale d'une étude QSPR/QSAR

Chapitre II: Bases de données et descripteurs moléculaires (2 semaines)

- II.1. Les descripteurs moléculaires théoriques
- II.2. Les descripteurs moléculaires empiriques

Chapitre III: Validation et domaine d'applicabilité d'un modèle QSPR/QSAR (3 semaines)

- III.1. Validation interne
- III.2. Validation externe
- III.3. Domaine d'applicabilité
- III.4. Applications QSAR/QSPR

Chapitre IV: Théorie des graphes et notion de Smiles (3 semaines)

- IV.1. Définition de graphe et vocabulaire
- IV.2. Représentations et invariants
- IV.3. Décompositions arborescentes et en branches
- IV.4. Présentation d'une structure sous forme de Smiles

Chapitre V: Docking moléculaire (4 semaines)

- V.1- Présentation et définition
- V.2- Nomenclature (Ligand-Récepteur-Interaction)
- V.3- Types de docking
- V.4- Etapes du Docking
- V.5- Modélisation des interactions moléculaires
- V.6- Docking moléculaire et Drug-design

Chapitre 7 : Prédiction des propriétés ADMET et Drug likeness

Mode d'évaluation: Contrôle continu : 33% ; Examen Final : 67%.

Références bibliographiques :

1. Kunal Roy, A Primer on QSAR/QSPR Modeling Fundamental Concepts springer 2015.
2. L.P. Hammett, The effect of structure upon the reactions of organic compounds. Benzene derivatives. *J. Am. Chem. Soc.* . **1937**, 59, 96-103.
3. A.C. Brown, and T.R. Fraser, On the connection between chemical constitution and Physiological Action; with special reference to the physiological action of the salts of the ammonium bases derived from Strychnia, Brucia, Thebaia, Codeia, Morphia, and Nicotia, *J. Anat. Physiol.* **1868**, 2, 224-242.
4. C. Hansch, A. Leo, D. Hoekmann, Exploring QSAR: hydrophobic, electronic and steric constants. Washington, DC: *Am. Chem. Soc.* **1995**.
- 5 S.M. Free, J.W. Wilson, A mathematical contribution to structure–activity studies. *J. Med. Chem.* **1964**, 7, 395-399.
6. M. Grover, B. Singh, M. Bakshi, S. Singh, Quantitative structure- Property relationships in pharmaceutical research Part2. *Pharm. Sci. Tech. Today*, **2000**, 3, 50-57.
7. M. Grover, B. Singh, M. Bakshi, S. Singh, Quantitative structure–property relationships in pharmaceutical research–Part 1 *Pharm. Sci. Tech. Today* , **2000**, 3, 28-35.

Semestre: 3

Unité d'enseignement: UEM1-M2S3

Matière 1: TP chimie quantique avancée 3

VHS: 15h00 (TP: 1h00)

Objectifs de l'enseignement : *Cette matière permettra à l'étudiant de se familiariser avec le fondement théorique et le formalisme des méthodes avancées de la chimie quantique.*

Connaissances préalables recommandées : *Notions de base en mécanique quantique et chimie quantique acquises en licence et en M1 CTC et Notions de base de Thermodynamique statistique.*

Contenu de la matière :

TP1 : Calcul des grandeurs thermochimiques d'une molécule avec Gaussian (2 semaines)

- Molécules diatomiques linéaires
- Molécules polyatomiques linéaires
- Molécules polyatomiques linéaires

TP2 : Méthodes hybrides QM/MM (Quantum Mechanics / Molecular Mechanics) sur GaussView (2 semaines)

- Méthode ONIOM2 (Molécule à deux couches)
- Méthode ONIOM3 (Molécule à trois couches)

TP3. Modèles de solvation pour une **molécule** en solution. (3 semaines)

- Solvation explicite
- Solvation implicite (continuum diélectrique) avec les modèles PCM, C-PCM et SMD

TP4. Modèles de solvation pour une **réaction chimique** en solution (3 semaines)

- Solvation explicite
- Solvation implicite (continuum diélectrique) avec les modèles PCM, C-PCM et SMD

TP5. Calcul précis de l'énergie (2 semaines)

- Méthodes G2, G3 et G4
- Méthode CCSD
- Méthode CBS-4M et CBS-QB3

TP6. Calcul TD-DFT des spectres d'absorption et d'émission (2 semaines)

- UV-Visible
- Fluorescence

Mode d'évaluation : Contrôles continus 100%

Références bibliographiques :

- Ira N. Levine, "Quantum Chemistry", 7th Edition, Pearson (2014).
- Christopher J. Cramer, "Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models", 2nd Edition, Wiley (2004).
- Frank Jensen, "Introduction to computational Chemistry, Wiley (1999)
- A. R. Leach, "Molecular Modelling, Principles and Applications, Prentice Hall (1996)

Semestre: 3

Unité d'enseignement: UEM1-M2S3

Matière 1: Spectroscopie laser

VHS: 37h30 (Cours : 1h30 TP: 1h00)

Objectifs de l'enseignement (*Décrire ce que l'étudiant est censé avoir acquis comme compétences après le succès à cette matière – maximum 3 lignes*).

Apprendre une nouvelle technique d'analyse basée sur l'émission optique des plasmas induits par les lasers

Connaissances préalables recommandées (*descriptif succinct des connaissances requises pour pouvoir suivre cet enseignement – Maximum 2 lignes*).

Spectroscopie atomique et moléculaires ; principe des lasers ; calcul de spectres d'émission.

Chapitre 1 : Introduction (1 semaines)

- Spectroscopie optique d'émission
- Histoire de la technique de spectroscopie de plasma induit par laser

Chapitre 2 : Ablation laser (2 semaines)

- Interaction laser-cible
- Formation du plasma
- Expansion et émission du plasma

Chapitre 3 : Instrumentation (2 semaines)

- Lasers
- Spectromètres
- Détecteurs
- Calibration en longueur d'onde et en intensité

Chapitre 4 : Diagnostics des plasmas induits par laser (3 semaines)

- Enregistrement des spectres d'émission
- Identification des espèces émettrices du plasma
- Elargissement des raies d'émission
- Hypothèse de l'Equilibre Thermodynamique

Chapitre 5 : Analyse qualitative et quantitative (3 semaines)

- Mesure des paramètres de plasma
- Détermination de la concentration des espèces du plasma
- Effet de matrice

Travaux pratiques (4 semaines)

TP01 : Spectroscopie optique d'émission d'un plasma induit par laser
TP02 : Identification des espèces émettrices du plasma
TP03 : Calibration en longueur d'onde et en intensité
TP04 : Mesures de températures et de densité du plasma
TP05 : Modélisation de la chimie du plasma
TP06 : Modélisation des propriétés d'optique non linéaire
TP07 : Modélisation des spectres d'émission (fluorescence et phosphorescence)
TP08 : Modélisation de propriétés photovoltaïques et électroluminescence)

Mode d'évaluation : 67% Examen + 33% Continu

Références Livres et photocopiés, sites internet, etc.

David A. Cremers, Leon J. Radziemski, Handbook of Laser-Induced Breakdown Spectroscopy, 2006.

David A. Cremers, Leon J. Radziemski, Handbook of Laser-Induced Breakdown Spectroscopy, 2013.

Semestre: 3

Unité d'enseignement: UEM1-M2S3

Matière 1: TP modélisation QSPR/QSAR et Docking Moléculaire

VHS: 15h00 (TP: 1h00)

Objectifs de l'enseignement:

Cette matière permettra à l'étudiant de se familiariser avec les méthodes de modélisation QSPR/QSAR

Contenu de la matière:

TP1: Calcul des descripteurs pour une base de données (3 semaines)

TP2: Etude QSPR de l'acidité d'une série d'acides organiques (2 semaines)

TP3: Etude QSAR de l'activité antioxydante d'une série de polyphénols en utilisant la méthode MLR (2 semaines)

TP4: Etude QSAR du facteur de bioaccumulation en utilisant la méthode PLS (2 semaines)

TP5: Etude QSAR de la toxicité d'une série de phénols halogénés-validation et domaine d'applicabilité (2 semaines)

TP6 : Etude par docking moléculaire de l'activité anticancer du raloxifane en utilisant autodock tools (2 semaines)

TP7: Etude par docking moléculaire de l'activité anticancer du raloxifane en utilisant autodock vina (2 semaines)

Mode d'évaluation: Contrôles Continus : 100 %

Références bibliographiques :

- 1- <https://autodock.scripps.edu>
- 2- <https://vina.scripps.edu>

Semestre: 3

Unité d'enseignement: UEM1-M2S3

Matière 1: Programmation et intelligence artificielle 2

VHS: 37h30 (Cours 1h30 TP: 1h00)

Objectifs de l'enseignement (Décrire ce que l'étudiant est censé avoir acquis comme compétences après le succès à cette matière – maximum 3 lignes).

Le but de cette matière est savoir utiliser l'intelligence artificielle (IA) en chimie. L'IA permet de développer des modèles intelligents pour simuler afin de prédire des chemins réactionnels dans la synthèse des composés.

Connaissances préalables recommandées (*descriptif succinct des connaissances requises pour pouvoir suivre cet enseignement – Maximum 2 lignes*).

CHAPTER 1 : DEEP LEARNING (5 semaines)

- Definition and Overview
- Fundamentals of Neural Networks
- Deep Learning Architectures
- Training Deep Neural Networks
- Evaluation and Performance Metrics
- Tools and Frameworks for DL
 - Tensorflow
 - PyTorch

CHAPTER 2 : SCIENTIFIC APPLICATIONS (5 semaines)

- Applications in experimental and theoretical chemistry using:
 - ML (Sci-Learn),
 - DL (Tensorflow)
 - Pretarined models (DeepChem, TensorMol, ChemGPT)
- Applications in biology, medical and pharma using:
 - ChemBL API,
 - RDKit,
 - Evo
 - AlphaFold.
- Applications in materials science using:
 - Material Project API
 - Matminer
- Applications using :
 - AI plugin for PySCF
 - AI plugin for Quantum Espresso
 - DeepDFT & DeepMD

CHAPTER 2 : INTRODUCTION TO GENERATIVE AI, LLMs & AI-AGENTS (5 semaines)

- GenAI
 - Variational autoencoders (VAEs)
 - Generative adversarial networks (GANs)
 - Diffusion models
 - Transformers
 - Applications of GenAI
- AI-Agents
 - Local AI Agents using LLMs (LLAMA, DeepSeek and Qwen)
 - API-based AI Agents using LLMs (LLAMA, DeepSeek and Qwen)

MINI-PROJECTS

Mode d'évaluation : 67% Examen + 33% Continu

Références *Livres et photocopiés, sites internet, etc.*

Semestre: 3

Unité d'enseignement: UED1-M2S3

Matière 1: Colloïdes

VHS: 22h30 (Cours: 1h30)

Objectifs de l'enseignement :

Cette matière permettra à l'étudiant de comprendre la nature et les propriétés des systèmes colloïdaux Étudier les interactions, stabilisation et déstabilisation des colloïdes.

Connaissances préalables recommandées : /

Contenu de la matière :

1. Introduction aux systèmes colloïdaux (2 semaines)

2. Structure et propriétés des colloïdes (2 semaines)

- Nature des particules colloïdales (solides, liquides, gaz)
- Morphologie et taille des particules (techniques de caractérisation : DLS, microscopie)
- Comportement en milieu aqueux et non aqueux

3. Interactions dans les colloïdes (4 semaines)

- Forces de Van der Waals
- Charges électriques et double couche électrique (théorie de Debye-Hückel)
- Forces de répulsion électrostatique et stabilisation
- Forces de déstabilisation (coalescence, floculation, agrégation)

4. Théories de la stabilité colloïdale (4 semaines)

- Théorie DLVO (Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek)
- Modèles de stabilisation par agents tensioactifs ou polymères
- Effets du pH, de la salinité, de la température

5. Applications industrielles et biologiques (3 semaines)

- Colloïdes en pharmacie, cosmétique, alimentation
- Rôle dans les processus biologiques (liposomes, protéines colloïdales)
- Défis et perspectives

Mode d'évaluation : Contrôles continus : 100%

Semestre: 3

Unité d'enseignement: UED1-M2S3

Matière 1: Analyse mathématique

VHS: 22h30 (Cours: 1h30)

Objectifs de l'enseignement (Décrire ce que l'étudiant est censé avoir acquis comme compétences après le succès à cette matière – maximum 3 lignes).

Le but de ce cours est d'apprendre à utiliser certains outils mathématiques d'usage fréquent en chimie / physique et d'acquérir une connaissance opérationnelle.

Connaissances préalables recommandées (descriptif succinct des connaissances requises pour pouvoir suivre cet enseignement – Maximum 2 lignes).

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Séries entières (4 semaines)

Rayon de convergence. Continuité et dérivabilité de la somme. Développement en série entière des fonctions classiques. Application à la résolution d'équations différentielles.

Chapitre 2 : Séries de Fourier (4 semaines)

Séries Trigonométriques. Développement en série de Fourier. Théorèmes de convergences (simple, quadratique, et normale). Théorème de Dirichlet et Égalité de Parseval. Inégalité de Bessel. Applications.

Chapitre 3 : Transformée de Fourier (4 semaines)

Transformée et transformée de Fourier inverse. Propriétés. Produit de convolution. Application de la transformée de Fourier à la résolution d'équations différentielles en dérivées ordinaires et partielles et équations intégrales.

Chapitre 4 : Introduction aux équations aux dérivées partielles. Équation de Laplace. Équation des ondes. Équation de la chaleur. (3 semaines)

Mode d'évaluation : 67% Examen + 33% Continu

Références Livres et polycopiés, sites internet, etc.

Semestre: 3

Unité d'enseignement: UED1-M2S3

Matière 1: Chimie du vivant

VHS: 22h30 (Cours: 1h30)

Objectifs de l'enseignement

-Approfondir les connaissances à l'interface de la chimie et de la biologie

Connaissances préalables recommandées

L'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du tronc commun de la licence.

Contenu de la matière :

-Aspects généraux de pharmacologie moléculaire : (3 semaines)

- Notions de récepteurs,
- Mode d'action de quelques médicaments,
- Procédures de mise sur le marché.

-Aspects biochimique de la transmission de l'information (3 semaines)

- Cascades enzymatiques.

-Contrôle de l'expression et du transfert de gènes

- Notions de génétique moléculaire.

-Méthodes d'analyse des macromolécules par RMN multidimensionnelle (3 semaines):

- Application à l'étude de macromolécules.

-Analyse des macromolécules par spectrométrie de masse, infrarouge, fluorescence, dichroïsme circulaire. (3 semaines)

-Membranes cellulaires, et phospholipides, phénomènes d'auto-organisation cellulaire. (3 semaines)

Mode d'évaluation : examen

Références :

- Moulin M. ; Coquerel A. Pharmacologie, Elsevier Masson, 2002.

- Audigé C.; Zonsain F. Biochimie métabolique, Biosciences et techniques, 1993.

Semestre: 3

Unité d'enseignement: UED1-M2S3

Matière 1: Notions de biochimie et de chimie thérapeutique (NBCT)

VHS :22h30 (Cours: 1h30)

Objectifs de l'enseignement:

Cette matière consiste à donner aux étudiants les outils pour mieux appréhender la modélisation moléculaire et les méthodes semi-empiriques ; en leur donnant quelques notions de biochimie et passer en revue quelques substances biologiquement actives (synthétiques et naturelles).

Connaissances préalables recommandées:

Les grandes fonctions de Chimie organique (Alcools, Cétones, Amines, Acides carboxyliques, ... etc) ainsi que toutes les grandes réactions et leur mécanisme.

Contenu de la matière:

Cette matière se divise en 2 grandes parties :

1^{ère} Partie : Notions de Biochimie

- Généralités (1 semaine)
- Les Peptides (2 semaines)
- Les Protéines (2 semaines)
- Les Enzymes (2 semaines)
- Les Glucosides (2 semaines)
- Les Lipides (1 semaine)

2^{ème} partie : Chimie Thérapeutique (5 semaines)

Classification des grandes familles de médicaments et description sommaire de quelques substances thérapeutiques (Psychotiques, analgésiques, antidouleurs, antihistaminiques, médicaments du système cardiovasculaire, antiseptiques et antiparasitaires)

Mode d'évaluation: Contrôles continus: 33.% ; Examen final: 67%.

Références bibliographiques :

- 1- ...« Chimie organique » (Allinger) Tome 1, 2 et 3
- 2- "Art of Drugs Synthesis" Edited by DOUGLAS S. JOHNSON and JIE JACK LI
Wiley 2007

Semestre: 3

Unité d'enseignement: UED1-M2S3

Matière 1: Chimie des Matériaux

VHS :22h30 (Cours: 1h30)

Objectifs de l'enseignement :

Ce cours vise à fournir aux étudiants une compréhension approfondie des matériaux avancés et de leurs propriétés, en mettant l'accent sur les approches théoriques et computationnelles pour leur modélisation et leur conception. Les étudiants apprendront à relier la structure électronique et la dynamique moléculaire aux propriétés macroscopiques des matériaux.

Connaissances préalables recommandées :

Une solide base en chimie générale, en mathématiques et en physique fondamentale est essentielle, accompagnée de notions de physique quantique et de programmation de base ; une familiarité avec les concepts de cristallographie et les outils de modélisation moléculaire serait un atout supplémentaire pour aborder efficacement ces domaines

Contenu de la matière :

Chapitre I : Introduction à la Chimie des Matériaux (2 semaines)

- I.1. Définition et classification des matériaux (métaux, céramiques, polymères, nanomatériaux)
- I.2. Relation structure-propriété
- I.3. Outils de modélisation en chimie des matériaux (DFT, dynamique moléculaire, Monte Carlo)

Chapitre II : Matériaux Cristallins et Défauts (2 semaines)

- II.1. Structure cristalline
- II.2. Défauts cristallins (Stœchiométrie et non-stœchiométrie)
- II.3. Simulations de défauts cristallins
- II.4. Méthodes de caractérisation

Chapitre III : Matériaux Amorphes et Verres (3 semaines)

- III.1. Différence entre matériaux cristallins et amorphes
- III.2. Modélisation des verres et des liquides surfondus
- III.3. Transition vitreuse et propriétés thermiques
- III.4. Méthodes de caractérisation

Chapitre IV : Polymères et Matériaux Souples (2 semaines)

- IV.1. Structure et propriétés des polymères
- IV.2. Modélisation des chaînes polymériques (méthodes de champ moyen)
- IV.3. Simulation de la dynamique des polymères (GROMACS)
- IV.4. Méthodes de caractérisation

Chapitre V : Nanomatériaux et Matériaux 2D (2 semaines)

- V.1.** Propriétés quantiques des nanoparticules
- V.2.** Graphène, MXenes et autres matériaux 2D
- V.3.** Méthodes DFT pour les systèmes nanostructurés
- V.4.** Méthodes de caractérisation

Chapitre VI : Matériaux pour l'Énergie (2 semaines)

- VI.1.** Piles à combustible, batteries, supercondensateurs
- VI.2.** Catalyseurs et matériaux pour la photocatalyse
- VI.3.** Modélisation des interfaces électrochimiques
- VI.4.** Méthodes de caractérisation

Chapitre VII : Matériaux Intelligents et Fonctionnels (2 semaines)

- VII.1.** Matériaux magnétiques, piézoélectriques
- VII.2.** Polymères conducteurs et matériaux photovoltaïques
- VII.3.** Conception computationnelle de matériaux "sur mesure"
- VII.4.** Méthodes de caractérisation

Mode d'évaluation : continu et examen

Références bibliographiques :

Livres :

- Materials Chemistry* de Bradley D. Fahlman.
- Introduction to Materials Chemistry* de Harry R. Allcock.
- Revues scientifiques :
 - Chemistry of Materials (ACS), Advanced Materials.

Semestre: 3

Unité d'enseignement: UET1-M2S3

Matière 1: Startups, Entrepreneuriat et Innovation (SEI)

Objectifs de l'enseignement :

Donner aux étudiants une vision globale de l'entrepreneuriat moderne, développer leur esprit entrepreneurial et leur capacité à initier un projet.

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Fondements de l'Entrepreneuriat

- Définition, création de valeur par l'innovation et la prise de risque.
- Piliers : opportunité, innovation, gestion du risque, création de valeur.
- Écosystème : chercheurs-entrepreneurs, investisseurs, incubateurs, clusters.
- Processus : Idéation → Validation → Business Plan → Lancement → Croissance.
- Enjeux scientifiques : brevets, normes, financement R&D, équipes pluridisciplinaires.
- Cas pratiques : simulation de dépôt de brevet, recherche de financement.

Chapitre 2 : L'esprit entrepreneurial dans les sciences et technologies

- Comprendre l'entrepreneuriat scientifique et technologique.
- Esprit entrepreneurial : créativité, innovation, résilience, gestion du risque.
- Motivations à entreprendre dans les domaines scientifiques et technologiques.
- Grands secteurs d'opportunités : énergie, santé, matériaux, numérique, environnement, sciences alimentaires.

Chapitre 3 : De la recherche scientifique à l'opportunité entrepreneuriale

- Transformer une découverte scientifique ou technologique en projet entrepreneurial.
- Approche "problème-solution" : identifier un besoin réel.
- Initiation à l'étude de marché pour projets scientifiques.
- Validation rapide d'une idée : prototype minimum viable (MVP), enquêtes, tests utilisateurs.

Chapitre 4 : Construire et modéliser son projet innovant

- Introduction au Business Model Canvas (BMC) pour projets technologiques.
- Définir une proposition de valeur claire et différenciante.
- Identifier ressources, partenaires stratégiques, canaux de distribution.

Chapitre 5 : Lancer son projet scientifique ou technologique

- Étapes clés pour passer de l'idée au projet structuré.
- Sources classiques de financement en phase de démarrage : fonds d'amorçage, concours, soutiens privés.
- Savoir pitcher : vulgariser une innovation pour convaincre investisseurs, partenaires et premiers clients.
- Erreurs fréquentes à éviter : mauvaise évaluation du marché, développement technologique déconnecté du besoin réel.

Chapitre 6 : Réussir et se développer comme entrepreneur scientifique

- Gestion du risque et de l'incertitude dans les projets innovants.
- Stratégies de pivot : adapter son projet selon les retours du marché.
- Leadership scientifique : organiser et animer une équipe pluridisciplinaire.
- Bases de la propriété intellectuelle : brevets, licences, valorisation de l'innovation, protection.
- Entrepreneuriat à impact : répondre aux défis environnementaux, sociaux et économiques.
- Continuer à progresser : réseaux d'innovation, incubateurs, mentors, formations continues.

Références :

1. Verstraete, Thierry, et Fayolle, Alain, *Entrepreneuriat : Fondements et dynamiques*. Édition De Boeck Supérieur, 2005.
2. Julien, Pierre-André, *Entrepreneuriat : devenir entrepreneur : théories et pratiques*. Édition

Économica, 2007.

3. Schieb-Bienfait, Nathalie, et Lemoine, Valérie, Entrepreneuriat : théories et réalités entrepreneuriales. Édition EMS (Management & Société), 2013.

4. Fayolle, Alain, Entrepreneuriat : Apprendre à entreprendre, Édition Dunod, 2014.