

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

نموذج مطابقة و مواءمة

عرض تكوين ماستر أكاديمي
2025 – 2026

التخصص	الشعبة	ميدان
كيمياء فيزيائية	الكيمياء	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. MASTER ACADEMIQUE

2025 – 2026

Domaine	Filière	Spécialité
SCIENCES DE LA MATIERE	CHIMIE	Chimie Physique

I – Fiche d'organisation semestrielle des enseignements
(S1, S2 et S3)

Semestre 1 :

Master Chimie Physique

Unité d'Enseignement	Matières	VHS	V.H hebdomadaire			Autres	Coeff	Crédits	Mode d'évaluation	
	Intitulé	15 Semaines	C	TD	TP				Continu	Examen
UE Fondamental Code : UEF 1 Crédits : 18 Coefficient : 9	Thermodynamique Appliquée	67h30	3h00	1h30		82h30	3	6	33%	67%
	Électrochimie Approfondie	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
	Chimie Quantique et Réactivité	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
	Techniques d'Analyses Physicochimiques I	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
UE Méthodologie Code : UEM 1 Crédits : 9 Coefficient : 5	TP Electrochimie	22h30			1h30	27h30	1	2	50%	50%
	TP Chimie Physique I	22h30			1h30	27h30	1	2	50%	50%
	Intelligence artificielle et Machine Learning 1	15h00			1h00	10h00	1	1	50%	50%
	Mathématiques Appliquées à la Chimie	45h00	1h30		1h30	55h00	2	4	50%	50%
UE Découverte Code : UED 1 Crédits : 2 Coefficient : 2	Propriétés Physicochimiques des Matériaux	22h30	1h30			02h30	1	1		100%
	Nanosciences et Nanotechnologie	22h30	1h30			02h30	1	1		100%
UE Transversal Code : UET 1 Crédits : 1 Coefficient : 1	Méthodologie de Recherche Bibliographique	22h30	1h30			02h30	1	1		100%
Total Semestre 1		375h00	13h30	6h00	5h30	375h00	17	30		

Semestre 2 :

Master Chimie Physique

Unité d'Enseignement	Matières	VHS	V.H hebdomadaire			Autres	Coeff	Crédits	Mode d'évaluation	
	Intitulé	15 Semaines	C	TD	TP				Continu	Examen
UE Fondamental Code : UEF 1.2 Crédits : 18 Coefficient : 9	Chimie Physique des Surfaces et Interfaces	67h30	3h00	1h30		82h30	3	6	33%	67%
	Chimie du Solide	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
	Cinétique Chimique Avancée	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
	Techniques d'Analyses Physicochimiques II	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
UE Méthodologie Code : UEM 1.2 Crédits : 9 Coefficient : 5	TP chimie des Surfaces	22h30			1h30	27h30	1	2	50%	50%
	TP Chimie Physique II/ TP Cinétique	22h30			1h30	27h30	1	2	50%	50%
	Chimiométrie, Analyse des Données et plans d'expériences	45h00	1h30		1h30	55h00	2	4	50%	50%
	Intelligence artificielle et Machine Learning 2	15h00			1h00	10h00	1	1	50%	50%
UE Découverte Code : UED 1.2 Crédits : 2 Coefficient : 2	Choisir une matière parmi - Recyclage et Cycle de Vie des Matériaux Semi-conducteur et Applications	22h30	1h30			02h30	1	1		100%
	Choisir une matière parmi : - Matériaux Moléculaires - Chimie Verte	22h30	1h30			02h30	1	1		100%
UE Transversal Code : UET 1.2 Crédits : 1 Coefficient : 1	Logiciels Libres et Open Source de la spécialité	22h30	1h30			02h30	1	1		100%
Total Semestre 2		375h00	13h30	6h00	5h30	375h00	17	30		

Semestre 3 :

Master Chimie Physique

Unité d'Enseignement	Matières	VHS	V.H hebdomadaire			Autres	Coeff	Crédits	Mode d'évaluation	
	Intitulé	15 Semaines	C	TD	TP				Continu	Examen
UE Fondamental Code : UEF 2.1 Crédits : 18 Coefficient : 9	Électrochimie Appliquée	67h30	3h00	1h30		82h30	3	6	33%	67%
	Thermodynamique Statistique	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
	Nanomatériaux pour le Développement Durable	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
	Méthodes de Caractérisation de Matériaux	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
UE Méthodologie Code : UEM 2.1 Crédits : 9 Coefficient : 5	Modélisation Moléculaire	45h00	1h30		1h30	55h00	2	4	50%	50%
	TP Thermodynamique statistique par logiciel open source	15h00			1h00	10h00	1	1	50%	50%
	TP Synthèse des Matériaux	22h30			1h30	27h30	1	2	50%	50%
	TP Caractérisation des Matériaux	22h30			1h30	27h30	1	2	50%	50%
UE Découverte Code : UED 2.1 Crédits : 2 Coefficient : 2	Chimie de Coordination	45h00	1h30	1h30		05h00	2	2	33%	67 %
UE Transversal Code : UET 2.1 Crédits : 1 Coefficient : 1	Entrepreneuriat, Innovation et Startup	22h30	1h30			2h30	1	1		100%
Total Semestre 3		375h00	12h00	7h30	5h30	375h00	17	30		

III - Programme détaillé par matière du semestre S1

Adapter le programme des cours et travaux dirigés (TD) en fonction du volume horaire hebdomadaire présentiel (VHH présentiel) et du volume horaire hebdomadaire personnel (VHH personnel).

Semestre : 1

UE : Fondamentale

Matière : Thermodynamique Appliquée

Objectifs de l'enseignement

L'enseignement de cette matière permet à l'étudiant de comprendre les bases de la thermodynamique et de la cinétique formelle appliquées aux systèmes matériels. Il vise également à maîtriser les types de diagrammes binaires (solutions solides, eutectiques, péritectiques, etc.) et leurs règles d'interprétation. Enfin, il permet d'appliquer ces connaissances à des cas industriels comme la lecture du diagramme des bronzes et l'optimisation des traitements thermiques.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé les bases de thermodynamique chimique, notions de la chimie générale et physico-chimie des solutions (solutions idéales et réelles : activité, coefficient d'activité), ainsi que les notions sur les alliages métalliques : solutions solides, composés intermédiaires ; définitions de base du point eutectique, péritectique...

Contenu de la matière :

1. Notions générales (2 semaines)

- Notion d'équilibre entre phases
- Règle ou loi des phases
- Règle des segments inverses
- Les écarts à l'équilibre
- Imprécisions sur les diagrammes
- Dénomination des phases

2. Les différents types de diagrammes binaires : cas de la diffusion parfaite dans le solide et dans le liquide (5 semaines)

- Cas des alliages formant des solutions solides illimitées
- Cas des alliages formant des solutions solides limitées
- Cas des alliages formant un eutectique
- Cas des alliages formant un eutectoïde
- Cas des alliages formant un péritectique
- Cas des alliages formant un péritectoïde
- Cas des alliages formant des phases intermédiaires
- Cas des alliages formant une lacune de miscibilité à l'état liquide
- Cas général des diagrammes d'équilibre

3. Cas pratique de la diffusion imparfaite : que deviennent les diagrammes d'équilibre ? (3 semaines)

- Cas du diagramme en fuseau
- Cas du diagramme eutectique

4. Applications des diagrammes d'équilibre (2 semaines)

- Introduction aux applications industrielles
- Utilisation dans la métallurgie et les traitements thermiques

5. Lecture du diagramme des bronzes (3 semaines)

- Identification des différentes transformations et phases intermédiaires
- Diagramme pratique des recuits industriels
- Diagramme pratique des alliages bruts de fonderie

Références (Livres et polycopiés, sites internet, etc.) :

- Michel Soustelle : *Thermodynamique des matériaux – École des Mines de Saint-Étienne (EDP Sciences)*, DOI:10.51926/ISTE.9781784051549
- Michel Dupeux : *Introduction à la science des matériaux – Presses Polytechniques et Universitaires Romandes (PPUR)*
- Robert W. Balluffi, Samuel M. Allen, W. Craig Carter : *Kinetics of Materials – Wiley*
- Jean-Noel Pons, Michel Robineau : *Thermodynamique et équilibres chimiques – Cours et exercices corrigés*
- Geneviève M.L. Dumas, Roger I. Ben-Aim : *L'indispensable sur les diagrammes de phases*
- C. Moreau, J.-P. Payen : *Thermodynamique chimique – exercices et problèmes corrigés*

Semestre. 1

UE : Fondamentale

Matière : **Electrochimie Approfondie**

Objectifs de l'enseignement

L'étudiant maîtrise les aspects fondamentaux de l'électrochimie et leurs applications

Connaissances préalables recommandées

L'étudiant doit avoir des connaissances de base en électrochimie fondamentale.

Contenu de la matière :

Introduction

1. Diagrammes de Pourbaix (E-pH) (3 semaines)

- Introduction
- Définition et description d'un diagramme E-pH
- Rappels théoriques sur les principaux équilibres en solution aqueuse et les diagrammes de prédominance correspondants. : *Les équilibres acido-basiques, Les équilibres d'oxydoréductions ; Les équilibres de précipitation ; Les équilibres de complexation.*
- Utilité d'un diagramme E-pH
- Principe de construction d'un diagramme E-pH (mise au point des différentes frontières)
- Règles de construction d'un diagramme E-pH (conventions de tracés)
- Exploitation du diagramme E-pH de l'eau
- Exemple d'application (Tracé et exploitation du diagramme E-pH de l'élément chlore)

2. Aspects théoriques sur l'interface métal/solution (3 semaines)

- Généralités sur les réactions d'électrodes : Définition d'une réaction électrochimique ; Tension d'électrode (ddp interrassiale- Tension absolue) ; Tension relative d'un système électrochimique (Relation de Nernst) ; Tension mixte (potentiel de corrosion ou potentiel d'abandon $E_i = 0$)).
- Mise au point des étapes élémentaires caractérisant une réaction électrochimique : Schéma illustrant les différentes étapes élémentaires d'une réaction d'électrode ; Principe de chaque étape (Transfert de masse- réactions chimiques – réactions de surface et transfert de charge)
- Mesures électrochimiques : Description d'une cellule d'électrolyse à trois électrodes ; Description des électrodes et leur rôle ; Principe de la polarisation électrochimique (tracé des courbes intensité-potentiel I-E).
- Interface métal /sol : Structure de la double couche électrochimique ; Métal en absence du milieu extérieur (dans le vide) ; Métal en présence d'une solution d'électrolyte.
- Modèle théorique décrivant la structure de la double couche : Modèle D'Helmholtz ; Modèle de Gouy-Chapmann ; Modèle de Stern

3. Aspects cinétiques sur les réactions d'électrodes- Transfert de charge à l'interface métal/sol (3 semaines)

- Introduction
- Schéma électrique équivalent d'une cellule à deux électrodes
- Surtension d'activation ou de transfert de charge : Système rapide (réversible) ; Système lent (irréversible)
- Importance de la surtension d'activation (exemples illustratifs : dépôts de métaux moins nobles que H_2 , surtension de H_2 sur différents électrodes, fonctionnement d'une pile à combustible ...etc)
- Relation de Butler –Volmer : Aspects de cinétique chimique (vitesse d'une réaction, théorie

du complexe activé) ; Vitesse d'une réaction électrochimique limitée par transfert de charge ; Cas particulier de la relation de Butler-Volmer (droites de Tafel) ; Représentation graphiques de la relation de Butler-Volmer (courbes intensité-potentiel) ; Représentation graphique des droites de Tafel

4. Transfert de masse à l'interface métal/solution (2.5 semaines)

- Introduction
- Gradient de concentration
- Régime de diffusion pure
- Régime mixte (transfert de charge-diffusion)
- Modèle de diffusion (approche de diffusion de Nernst)
- Surtension de diffusion : *surtension de diffusion en régime stationnaire ; diffusion en présence d'un excès d'électrolyte support (loi de Fick 1, profil de concentration)*
- Courant de diffusion-signification
- Electrode à disque tournant (EDT) : Description de l'électrode EDT ; Montage expérimental et principe de mesure ; Analyse voltampérométrique d'un processus limité par transfert de masse- Critère de Levich ; Exemples d'application – étude d'un processus limité par diffusion et vérification du critère de Levich.

5. Méthodes électrochimiques d'analyse (3.5 semaines)

- Voltamétrie : cyclique, linéaire, impulsionnelle.
- Ampérométrie, potentiométrie, coulométrie.
- Spectroscopie d'impédance électrochimique (EIS).

Références bibliographiques

- Marcel Pourbaix, Atlas of Electrochemical Equilibria in Aqueous Solutions
- C. Rochaix, Electrochimie & Thermodynamique – Cinétique, Edition NATHAN
- Robert Rosset, Denise Bauer, Allen J. Bard, Larry R. Faulkner, Electrochimie- principes, méthodes et applications
- Allen J. Bard, Larry R. Faulkner, Henry S. White, Electrochemical Methods, Fundamentals and Applications
- Jean-Paul Diard, Bernard Le Gorrec, Claude Montella, Cinétique électrochimique.
- Bernard Le Gorrec, Claude Montella, Jean-Paul Diard, Equilibres chimiques et électrochimiques en solutions aqueuses

Semestre. 1

UE : Fondamentale

Matière : Chimie quantique et Réactivité

Objectifs de l'enseignement :

- Maîtriser les fondements de la chimie quantique pour les systèmes moléculaires.
- Comprendre les méthodes Hartree, Hartree-Fock et DFT.
- Analyser la réactivité chimique à l'aide d'outils théoriques modernes.
- Intégrer la modélisation des solvants dans les calculs moléculaires.
- Comprendre les principes, les limites et les usages de la dynamique moléculaire.

Connaissances préalables recommandées :

- L'étudiant doit avoir fait au préalable les modules de structure de la matière et d'introduction à la mécanique quantique de 2ème année licence chimie.

Contenu de la matière :

1. Fondements de la chimie quantique

- Postulats de la mécanique quantique
- Équation de Schrödinger
- Fonctions d'onde, opérateurs, observables

2. Méthodes Hartree et Hartree-Fock

- Approximation de Born-Oppenheimer
- Méthode de Hartree : produit d'orbitales indépendantes
- Méthode Hartree-Fock : antisymétrisation et déterminant de Slater Procédure auto-cohérente (SCF)
- Énergie de corrélation

3. Théorie de la DFT (Density Functional Theory)

- Théorèmes de Hohenberg-Kohn
- Méthode de Kohn-Sham
- Fonctionnelles d'échange-corrélation
- Comparaison HF vs. DFT
- Application à la chimie organique et bioinorganique

4. Descripteurs de réactivité quantique

- Théorie Cinétique de la Réactivité
- Description en Théorie de la Fonctionnelle de la Densité
- Descripteurs de réactivité globaux
- Descripteurs de réactivité locaux
- Théorie HSAB

5. Modélisation des solvants

- Importance des effets de solvant en chimie computationnelle
- Méthodes implicites : Modèle PCM (Polarizable Continuum Model), COSMO, SMD
- Méthodes explicites : Ajout de molécules de solvant dans le champ quantique
- Limitations : coût de calcul, structure, dynamique

6. Dynamique moléculaire

- Bases de la dynamique moléculaire classique :
- Intégration des équations de Newton
- Potentiels interatomiques (Lennard-Jones, Coulomb)
- Intégrateurs numériques : Verlet, Leapfrog

- Applications
- Étude du mouvement thermique
- Simulations de liquides, protéines, membranes
- Limites de la dynamique moléculaire

Références bibliographiques :

- Salem Lionel, *The molecular orbital theory of conjugated systems*, Ed. Benjamin, 1966.
- Nguyen Trong Anh, *Les règles de Woodward-Hoffmann*, Ediscience, 1970.
- Fukui K., *Theory of orientation and stereoselection*, Springer-Verlag, 1975.
- Rivail J. -L., *Eléments de chimie quantique à l'usage des chimistes*, InterEditions du CNRS, 1989.
- Nguyen Trong Anh, *Introduction à la chimie moléculaire*, Ed. Ellipses, 1994.
- Anh N.T., *Orbitales frontières*, InterEditions-CNRS Editions, Paris 1995.
- Chaquin P., *Manuel de Chimie théorique*, Ellipses, Paris, 2000.
- Jean Y., Volatron F., *Structure électronique des molécules*, Dunod, Paris, 2003.
- Pascal Le Floch, *Introduction à la chimie moléculaire par la théorie des orbitales frontières*, Ed. Éditions École polytechnique, 2006.
- Fleming I., *Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions*, Jonh Wiley & Sons, NewYork, 2009
- Chaquin P. et Volatron F., *Chimie Organique. Une approche orbitale*, DeBoeck, 2015.

Semestre. 1

UE : Fondamentale

Matière : **Techniques d'Analyses Physicochimiques I**

Objectifs de l'enseignement

- Donner à l'étudiant les connaissances nécessaires sur la spectroscopie atomique et moléculaire afin de pouvoir identifier ou doser des espèces inorganiques ou organiques.

Connaissances préalables recommandées

- Notions données en licence

Contenu de la matière

1. Introduction aux méthodes spectrochimiques

- Interaction rayonnement-matière : mécanismes d'absorption, d'émission et de diffusion, Transitions électroniques, vibrationnelles et rotationnelles.
- Types de spectroscopie (absorption, émission, fluorescence, diffusion),
- Paramètres spectraux : longueur d'onde, intensité, résolution, largeur à mi-hauteur, Domaines spectraux (UV, visible, IR, etc.).
- La spectroscopie d'absorption moléculaire : La spectroscopie d'absorption moléculaire dans les différents domaines du spectre de lumière : UV-VIS, IR,
- Raman : Principes, appareillages,

2. Spectrométrie d'absorption atomique (SAA)

- Principe
- Instruments de base
- Dosage par absorption atomique
- Quelques applications
- Protocole analytique

3. Spectroscopie de Résonance Magnétique Nucléaire (RMN)

- Introduction
- Principes généraux de la RMN
- Signal RMN et séquence de mesure
- Analyser un spectre RMN
- Spectrométrie RMN du ^{13}C
- Appareillage
- RMN multidimensionnelle : à 2D
- RMN 2D - L'idée de JEENER
- Corrélation homonucléaire - Spectre COSY
- Corrélations hétéronucléaires HSQC, HMBC
- Tableau résumant le rôle de séquences 2D

4. Les techniques d'analyse chimique globale

- **Spectrométrie de fluorescence X**
- **Spectrométries d'émission**
 - Spectrométrie par torche à plasma (ICP-optique)
 - Spectrométrie par décharge lumineuse (SDL)
 - Spectrométrie par étincelle
 - Analyse par ablation laser

- Spectromètre à décharge lumineuse
- **Analyseurs de gaz : analyse de O, N, C et S**
 - Analyse de l'oxygène et de l'azote
 - Analyse du carbone et du soufre

Références bibliographiques

- Chemical Analysis Modern Instrumental Methods and Techniques J. Tranchant,
- Manuel pratique de chromatographie en phase gazeuse, Masson, (1995) Robert E. Ardrey,
- Liquid chromatography Mass Spectrometry: An introduction, John Wiley & Sons (2004).
- J. Cazes, Encyclopedia of Chromatography 2004 Update Supplement, CRC (2004).
- Identification spectrométrique de composés organiques. R. M. Silverstein. G. C. Bassler. T. C. Morill. DeBoech. 1998.
- E. Pretsch, P. Bühlmann, C. Affolter Structure Determination of Organic Compounds. Tables of Spectral Data. 3rd Edition, Springer, 2000. ISBN 3-540-67815-8
- Understanding NMR Spectroscopy James Keeler. Wiley 2002.
- La Résonance Magnétique Nucléaire. Apprentissage à l'interprétation des spectres à une et deux dimensions des chaînes O-glycanniques Emmanuel MAES. Université des Sciences et Technologies de Lille. 2009.

Semestre. 1**UE : Méthodologie****Matière : TP Electrochimie****Objectifs de l'enseignement**

- Ces TP permettent aux étudiants de relier les concepts théoriques (thermodynamique, cinétique électrochimique) à des applications concrètes (corrosion, protection des matériaux, électroanalyse), ce qui est essentiel pour des futurs chercheurs ou ingénieurs en chimie physique ou matériaux.

Connaissances préalables recommandées :

- Bases d'électrochimie (thermodynamique des piles, équation de Nernst, notions d'oxydoréduction).
- Cinétique électrochimique (lois de Faraday, surtension, courbes courant-potentiel).
- Chimie en solution (équilibres acido-basiques, précipitation, diagrammes de Pourbaix).

La liste des TP citée ci-dessous n'est pas exhaustive. Elle constitue une orientation d'ordre général et dépendra des ressources disponibles pour chaque établissement :

Contenu de la matière :

- TP N°1 : Potentiel d'électrode et grandeurs thermodynamiques
- TP N°2 : Diagramme potentiel – pH du fer
- TP N°3 : Détermination de la vitesse de corrosion par méthode pondérale
- TP N°4 : Étude d'une courbe intensité – potentiel (courbe de polarisation)

Semestre. 1**UE : Méthodologie****Matière : TP Chimie-Physique I****Objectifs de l'enseignement**

Apprendre à l'étudiant à manipuler ou à effectuer des analyses par des méthodes physico-chimiques.

Connaissances préalables recommandées

Notions acquises dans l'unité fondamentale et en licence.

La liste des TP citée ci-dessous n'est pas exhaustive. Elle constitue une orientation d'ordre général et dépendra des ressources disponibles pour chaque établissement :

Contenu de la matière Selon disponibilité

- TP sur la spectroscopie UV-VIS,
- TP sur la spectroscopie IR,
- TP sur la spectroscopie Raman,
- TP sur la spectroscopie RMN,
- Autres méthodes de caractérisation nécessaires

Références bibliographiques

- Spectrométrie d'absorption atomique : Applications à l'analyse chimique, Maurice Pinta et Coll, ÉDITEURS MASSON et Cie, Paris, 1971.
- Cours de Chimie Analytique et caractérisation des matériaux. La spectrométrie. Steve Gillet, D. Sc., Website : <http://perso.latrimbu.com/shagar>.
- L'analyse thermique, A P Rollet; R Bouaziz, Editeur : Paris, Gauthier-Villars, 1972.
- Chimie Analytique (SKOOG, WEST, HOLLER) Edition de Boeck 1997,

Semestre : 1

UE : Méthodologie

Matière : Intelligence Artificielle et Machine Learning 1

Objectifs de l'enseignement

L'enseignement de cette matière permet à l'étudiant d'acquérir les bases de l'intelligence artificielle et de l'apprentissage automatique (Machine Learning), avec un accent particulier sur leurs applications dans les sciences des matériaux. Les étudiants découvriront les concepts fondamentaux de la modélisation basée sur les données et apprendront à appliquer des techniques d'apprentissage automatique pour résoudre des problèmes concrets liés aux propriétés et structures des matériaux.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir des bases en programmation (notamment en Python), en statistiques et en chimie ou physique des matériaux.

Contenu de la matière :

1. Introduction à l'IA et à l'apprentissage automatique (2 semaines)

- Aperçu de l'intelligence artificielle et ses domaines d'application
- Importance des données dans l'IA et l'apprentissage automatique

2. Concepts de base de l'apprentissage automatique (3 semaines)

- Apprentissage supervisé ou non supervisé.
- Algorithmes clés de l'apprentissage automatique : régression, classification, regroupement.
- Mesures d'évaluation (MAE, R^2 , précision)

3. Collecte et traitement des données (3 semaines)

- 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.

4. Apprentissage automatique pratique en sciences des matériaux (3 semaines)

- 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.

5. Fondements de l'apprentissage profond (3 semaines)

- Introduction aux réseaux neuronaux.
- Principaux cadres d'apprentissage profond : TensorFlow, Keras, PyTorch.
- Application : Prédiction de la structure cristalline à l'aide de réseaux neuronaux.

Références (Livres et polycopiés, sites internet, etc.) :

- Aurélien Géron : **Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow** – O'Reilly Media (2019)
- Christopher M. Bishop : **Pattern Recognition and Machine Learning** – Springer (2006)
- Langage de programmation : Python
- Environnements : Jupyter Notebooks
- Bibliothèques : Scikit-learn, Pandas, Matplotlib
- Outils dédiés aux matériaux : Matminer, Pymatgen

Semestre. 1

UE : Méthodologie

Matière : Mathématiques Appliquée à la Chimie

Objectifs de l'enseignement :

- Étudier des méthodes numériques permettant de résoudre avec un ordinateur des problèmes chimiques qui ne peuvent pas être traités de manière analytique.
- Identifier les notions d'approximation des données obtenues après expérimentation au laboratoire, ou à partir d'une fonction. Résoudre les problèmes chimiques traduisant les équations différentielles ordinaires

Connaissances préalables recommandées :

- Les prérequis exigés sont relatifs aux notions élémentaires en mathématiques abordées durant les premières années du cycle universitaire : équations différentielles ordinaires, techniques d'intégration standard, opérations matricielles de base.

Contenu de la matière :

- Résolution des équations non linéaires dans IR : Méthodes itératives (Point fixe-Lagrange-Newton)
- Intégration Numérique : Méthodes de Simpson et méthodes de trapèze
- Résolution des systèmes linéaires
- Méthodes directes : Méthode d'élimination de Gauss – Méthode de factorisation LU
- Méthodes itératives : Méthode de Jacobi- Méthode de Gauss-Seidel
- Résolution des équations différentielles : Méthode d'Euler – Méthode de Rung-Kutta
- Calculs Matriciels : Somme, différence et produit de Matrices, Matrice Inverse, transposée et unitaire, Valeurs et vecteurs propres.
- Notions de probabilité statistique : Le modèle probabiliste, Variables aléatoires : discrètes et continues, théorèmes limites (loi des grands nombres, théorème central limite, intervalles de confiances, ...)

Références bibliographiques :

- L'analyse statistique des données- Apprendre, comprendre et réaliser avec Excel, De Alain Morineau et Yves-Marie Chatelin – Ellipses
- Méthodes numériques- Algorithmes, analyse et applications, De Alfio Quarteroni, Ricardo Sacco et Fausto Saleri – Springer
- Analyse interactive des données (ACP, AFC) avec Excel 2000 - Théorie et pratique, De Jean-Pierre Georgin - Presses Universitaires de Rennes (PUR)
- Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation - Mathématiques appliquées pour le Master - Cours et exercices corrigés, De Philippe G. Ciarlet - Dunod
- L'analyse multivariée avec SPSS, De Jean Stafford et Paul Bodson - Presses de l'Université du Québec
- Analyse numérique et optimisation, De Grégoire Allaire - Les Éditions de l'École polytechnique
- Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivés partielles, De Pierre-Arnaud Raviart et Jean-Marie Thomas – Dunod

Semestre : 1

UE : Découverte

Matière : Propriétés Physicochimiques des Matériaux

Objectifs de l'enseignement

Ce module vise à comprendre et analyser les propriétés physico-chimiques des matériaux, avec un accent particulier sur leurs comportements diélectriques, magnétiques, élastiques, mécaniques et optiques. À la fin du semestre, l'étudiant sera capable d'identifier, interpréter et relier ces propriétés aux structures atomiques et microstructurales des matériaux.

Connaissances préalables recommandées

Pour suivre cette matière efficacement, l'étudiant doit avoir des bases en structure de la matière (structures cristallines, liaisons atomiques). Une compréhension des propriétés fondamentales des matériaux (conductivité, rigidité, comportement sous contrainte) est également recommandée, ainsi que des notions de mathématiques appliquées pour modéliser certains phénomènes.

Contenu de la matière :

1. De l'atome au matériau (6 semaines)

- Atomes – Liaisons – Structure (cristaux – amorphes)
- Classification des matériaux : Métaux et alliages – Céramiques et verres – Polymères
- Composites

2. Propriétés électriques (6 semaines)

- Conductivité - Métaux - Isolants - Semi-conducteurs

3. Propriétés magnétiques (8 semaines)

- Moment magnétique - (dia, para, ferro, antiferro, ferri)-magnétisme
- Généralités sur l'effet magnétostrictif
- Magnéto-électricité
- Applications

4. Propriétés optiques (6 semaines)

- Absorption, réflexion et transmission de la lumière
- Matériaux optiques : semi-conducteurs, verres, polymères
- Applications : photovoltaïque, optoélectronique

5. Propriétés thermiques (6 semaines)

- Dilatation
- Conduction
- Diffusion

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

- C. Kittel : Introduction to Solid State Physics – Wiley, (2005)
- Michel Soustelle : Aide-mémoire Science des Matériaux – Dunod, Paris, (2004) (pp. 89–130)
- W. D. Callister : Materials Science and Engineering: An Introduction – Wiley, (2007)
- A. Moliton : Physique des matériaux pour l'électronique* – Hermès-Lavoisier, (2007)

Semestre : 1

UE : Découverte

Matière : Nanosciences et Nanotechnologie

Objectifs de l'enseignement

L'enseignement de cette matière permet à l'étudiant de découvrir les fondements des nanosciences et des nanotechnologies, ainsi que leurs domaines d'applications variés tels que l'énergie, la santé, la nanoélectronique, la spintronique, et autres domaines technologiques avancés.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir des bases solides dans les sciences des matériaux ainsi que des notions sur les techniques d'élaboration des couches minces.

Contenu de la matière :

1. Préambule : Contexte actuel des nanosciences et nanotechnologies

2. Introduction aux nanosciences (2 semaines)

- L'échelle nano et ses applications
- Le comportement de la matière à cette échelle
- Fabrication des nanos
- Définition et champs d'application : aspect pluridisciplinaire

3. Les outils de fabrication et d'observation des nano-objets (3 semaines)

- Les techniques de fabrication des nano-objets : Comment fabriquer un nanos : Les différentes approches
- Les techniques d'observation de la matière à l'échelle nano : les appareils de microscopie utilisés à cette échelle

4. La Nanochimie (3 semaines)

- Le carbone et les différents nanomatériaux associés : Exemples d'application
- Synthétiser des nanoparticules (différentes stratégies), les solides poreux ?...

5. La Nanophysique (3 semaines)

- Les composants de la nanoélectronique : les effets quantiques dans la conduction électronique aux échelle nanométriques, Nanoélectronique sur silicium
- Les structures onano-optiques : Comportement de la lumière à l'échelle nano, Couleurs et nanoparticules, Emettre, guider et détecter la lumière avec des nano-composants....

6. Les Nanobiotechnologies (3 semaines)

- Nanobiologie : Voir le vivant aux nanoéchelles, détecter des interactions moléculaires, manipuler des objets biologiques nanométriques, ...
- Nanomédicaments : les nanomédicaments ; les nanovecteurs, design de nanovecteurs pour mieux cibler les cellules, interaction avec les cellules, ...
- Micro/nanofluidique : Lois d'écoulement des liquides biologiques à l'échelle micro/nano, Caractérisation de biomolécules dans des nanopores, Laboratoires sur puces, microfluidique digitale

7. Nanosciences et Société (2 semaines)

- Les nanosciences et les politiques scientifiques

- Nanotoxicité : enjeux sanitaires (effets des nanoparticules sur la santé),
- Ecotoxicité : enjeux environnementaux
- Réglementation : Cadre réglementaire des nanotechnologies ?

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

- *Luque, S. Hegedus: Handbook of Photovoltaic Science and Engineering – Wiley*
- *Marti : Next Generation Photovoltaics– Taylor & Francis Group*
- *Yves Quéré : Physique des matériaux – Ellipses*
- *Périodiques : Solar Energy Materials & Solar Cells, Applied Physics*

Semestre. 1

UE : Transversale

Matière : Méthodologie de Recherche Bibliographique

Objectifs généraux :

- Maîtriser les techniques de recherche documentaire scientifique.
- Savoir sélectionner et synthétiser des informations issues de la littérature.
- Structurer un document scientifique (rapport, mémoire, article).
- Rédiger de façon claire, rigoureuse et académique.
- Appliquer les normes de citation et éviter le plagiat.

Contenu de la matière

1. Introduction à la recherche documentaire scientifique (2 semaines)

- Définition d'une synthèse bibliographique : types de documents (revue, rapport, mémoire...).
- Définition d'une problématique scientifique.
- Présentation des principales bases de données : Google Scholar, Scopus, Web of Science, PubMed, ScienceDirect, HAL, etc.
- Évaluation de la fiabilité des sources.

2. Lecture et analyse des sources (2 semaines)

- Structure d'un article scientifique.
- Repérage des idées clés, hypothèses, méthodologies, résultats et limites.
- Fiches de lecture : résumé, positionnement, pertinence.
- Outils de gestion bibliographique : Zotero, Mendeley, EndNote.

3. Méthodologie de la synthèse et construction du rapport (3 semaines)

- Techniques de synthèse : regroupement thématique, chronologique, méthodologique.
- Éviter la paraphrase ou l'énumération.
- Élaboration d'un plan : introduction, développement thématique, conclusion.
- Stratégie de structuration des paragraphes (idée directrice, argument, exemple, transition).

4. Rédaction scientifique et normes de présentation (4 semaines)

- Style académique : clarté, objectivité, ton neutre.
- Éviter les fautes fréquentes : plagiat, paraphrase non référencée, citations excessives.
- Styles de citation : APA, Chicago, Vancouver, IEEE, etc.
- Bibliographie et citations automatiques avec Zotero.
- Mise en forme des documents (titres, intertitres, tableaux, figures, légendes).

5. Projet final et évaluation (3 semaines)

Rédaction d'une mini-revue de littérature par choix sur un ensemble de sujets de recherche (jusqu'à 10 pages). Présentation orale synthétique. Discussion des difficultés rencontrées.

III - Programme détaillé par matière du semestre S2

Semestre : 2

UE : Fondamentale

Matière : Chimie Physique des Surfaces et Interfaces

Objectifs de l'enseignement

L'objectif de cet enseignement est de permettre à l'étudiant de comprendre les concepts fondamentaux liés aux surfaces et interfaces, et d'appliquer ces connaissances à des problématiques industrielles et technologiques telles que la catalyse, les nanotechnologies, les matériaux poreux et les phénomènes interfaciaux.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé les bases de la chimie générale, notamment les notions de liaisons chimiques, interactions intermoléculaires et thermodynamique. Une compréhension des propriétés physico-chimiques des matériaux est également conseillée.

Contenu de la matière :

1. Thermodynamique et structure des surfaces

- Introduction
 - Notions de base : surface et interface – échelles macroscopique, microscopique et nanoscopique
 - Importance des surfaces et interfaces dans les domaines des matériaux, de la catalyse, de la biologie et des nanotechnologies
- Thermodynamique des surfaces
 - Énergie de surface et tension superficielle – mécanismes et mesures
 - Effets de la température et de la composition sur l'énergie de surface
 - Adsorption : modèles de Langmuir et BET – isothermes et applications
- Structure des surfaces
 - Reconstruction et relaxation des surfaces cristallines
 - Défauts superficiels : dislocations, marches, lacunes
 - Quelques notions sur les méthodes de caractérisation des surfaces

2. Interfaces et interactions avec le milieu extérieur

- Types des interfaces
 - Interfaces solide-solide (joints de grains, hétérostructures).
 - Interfaces solide-liquide (mouillage, angle de contact, loi de Young).
 - Interfaces solide-gaz (adsorption/absorption, corrosion sèche).
- Phénomènes interfaciaux
 - Mouillage dynamique et statique, hystérise : Hétérogénéité chimique de la surface, surface hydrophobe, super-hydrophobe, hydrophile...)
 - Adhésion et cohésion (théories de van der Waals, interactions électrostatiques).
 - Influence de la rugosité et de la chimie de surface.
- Interactions avec le milieu extérieur
 - Interaction avec les atomes/ions, molécule.
 - Interaction avec les électrons (émission électronique, effets

triboélectriques).

- Interaction avec les photons (réflexion, absorption, photocatalyse).

3. Collage / Adhésion et techniques de caractérisation

- Principes fondamentaux de l'adhésion : théories de l'adhésion (mécanique, électrostatique, diffusion, adsorption)
- Mécanismes de collage : liaisons chimiques, interactions physiques, enchevêtrement moléculaire
- Techniques de caractérisation de l'adhésion : tests de pelage, tests de cisaillement, test de traction
- Facteurs influençant la qualité des joints collés : préparation de surface, mouillabilité, compatibilité des matériaux
- Adhésifs structuraux et non-structuraux : classifications et propriétés
- Techniques d'amélioration de l'adhésion : traitements de surface spécifiques
- Vieillessement des interfaces collées : mécanismes de dégradation, durabilité

4. Phénomènes d'adsorption et caractérisation texturale

- Concepts fondamentaux et définitions : État et état poreux ; Porosité et distribution de taille des pores ; Surface spécifique et son importance ; Classification des matériaux poreux (microporeux, mésoporeux, macroporeux).
- Phénomènes d'adsorption : Différence entre adsorption physique et adsorption chimique, Forces et interactions mises en jeu ; Facteurs influençant l'adsorption (température, pression, nature de l'adsorbat et de l'adsorbant)
- Modèles de conceptions d'adsorption
 - Modèle de Langmuir : Hypothèses du modèle (monocouche d'adsorption), Dérivation et forme linéarisée de l'équation de Langmuir. Applications et limites du modèle
 - Modèle de Freundlich : Équation empirique pour surfaces des produits hétérogènes, la forme et les Domaines d'application
 - Théorie BET (Brunauer, Emmett et Teller) : Extension du modèle de Langmuir à l'adsorption multicouche ; Dérivation de l'équation BET ; Détermination de la surface spécifique ; Limites de la théorie BET
- Méthodes d'analyse texturale :
 - Isothermes d'adsorption/désorption de gaz (classification IUPAC)
 - Instrumentation pour la mesure d'adsorption gazeuse
 - Porosimétrie au mercure
 - Méthodes complémentaires (t-plot, BJH)

5. Matériaux poreux et leurs applications

- Microporeux Matériaux
 - Structure, propriétés et applications
 - Charbons actifs : préparation et caractéristiques
- Matériaux mésoporeux
 - Matériaux mésoporeux organisés à base de tensioactifs structurants (MCM-41, SBA-15)
 - Xérogels et aérogels : méthodes de synthèse et propriétés
- Applications des matériaux poreux
 - Catalyse de la procédure d'indemnisation des produits
 - Adsorption et séparation
 - Stockage d'énergie

- Applications environnementales

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

- G.A. Somorjai, Y. Li : *Surface Science : Foundations, Technology, and Application*
- R.F. Willis : *Surface Science : Principles and Applications*
- G.L. Richmond : *Interfacial Science : An Introduction*
- Horiuchi, Shin., Terasaki, Nao., Miyamae, Takayuki : *Interfacial Phenomena in Adhesion and Adhesive Bonding*
- T. Davies, E.K. Rideal : *Interfacial Phenomena*
- G.A. Somorjai : *Interfacial Science: An Introduction*
- J.C. Rivière : *Handbook of Surface and Interface Analysis*

Semestre : 2

UE : Fondamentale

Matière : Chimie du Solide

Objectifs de l'enseignement

L'objectif de cet enseignement est de permettre à l'étudiant de prendre connaissance des différentes classes de matériaux solides et de leurs principaux domaines d'application. Son objectif est également de délivrer les connaissances fondamentales et indispensables à la compréhension et à l'étude des propriétés des matériaux solides.

Connaissances préalables recommandées

Programme licence chimie

Contenu de la matière :

1. Introduction (Durée suggérée : 2 semaines)

- Les différents types de liaisons dans les solides (covalente, ionique, métallique, intermoléculaires)
- Solides amorphes, cristallins, semi-cristallins
- Propriétés générales des solides et classification des solides
 - Solutions solides de substitution primaire
 - Solutions solides de substitution secondaire ou intermédiaires
 - Solutions solides d'insertion
 - Composés définis

2. Défauts ponctuels dans les solides stœchiométriques (Durée suggérée : 3 semaines)

- Défauts intrinsèques
- Défauts neutres et charges. Charge effective
- Règles pour écrire les réactions de défauts
- Nécessité thermodynamique des défauts et équilibre de défauts
- Potentiel chimique des défauts et loi d'action des masses, Unités de construction

Potentiel chimique et activité des électrons

3. Défauts ponctuels dans les solides non-stœchiométriques (Durée suggérée : 2 semaines)

- Composés non-stœchiométriques
- Exemples d'oxydes non-stœchiométriques
- Défauts minoritaires

4. Substitutions dans les solides. Dopage (Durée suggérée : 2 semaines)

- Substitution par un élément de même valence
- Substitution par un cation de valence inférieure
- Substitution par un cation de valence supérieure

5. Energies de formation et d'ionisation des défauts. Défauts dans un diagramme de bandes (Durée suggérée : 2 semaines)

- Energie de formation des défauts
- Défauts dans un diagramme de bandes

6. Diffusion dans les oxydes (Durée suggérée : 2 semaines)

- Cinétique de diffusion
- La dépendance de coefficient de diffusion
- Relation entre mobilité et coefficient de diffusion
- Conductivité dans les oxydes

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

- J.-F. Marucco : *Chimie des solides* (EDP Sciences)
- L. Smart et E. Moore : *Introduction à la chimie du solide* (Masson)
- L. Smart and E. Moore: *Solid State Chemistry: An Introduction* (Chapman & Hall)
- A. R. West: *Basic Solid-State Chemistry* (Wiley)
- P. F. Weller: *Solid State Chemistry and Physics*
- *Progress in Solid State Chemistry (Series): Harvard Reiss Editor*

Semestre : 2

UE : Fondamentale

Matière : Cinétique Chimique Avancée

Objectifs de l'enseignement :

- Compréhension des concepts fondamentaux de la cinétique chimique.
- Analyse des vitesses de réaction.
- Étude des mécanismes réactionnels. Étude des collisions moléculaires.
- Compréhension des mécanismes catalytiques

Connaissances préalables recommandées :

Notions de Chimie générale :

- Les réactions chimiques, les équations chimiques.
- Notions de base thermodynamique (l'énergie, l'enthalpie, l'entropie et l'énergie libre).
- Notions sur les constantes d'équilibre et leur relation avec les concentrations des réactifs et des produits.

Contenu de la matière :

1. Rappels fondamentaux

- Introduction (Définition et objectifs de la cinétique chimique)
- Rappels de thermodynamique (affinité chimique, équilibre)
- Facteurs de la cinétique :
 - Concentrations (loi de vitesse, ordre de réaction, temps de demi-réaction)
 - Température (loi d'Arrhenius, énergie d'activation)
- Méthodes expérimentales de mesure des vitesses (chimiques et physiques)

2. Cinétique formelle des réactions complexes

- Les réactions élémentaires
- La molécularité d'une réaction élémentaire
- Les mécanismes de réaction
- Méthodes d'approximation :
 - Approximation de l'état quasi stationnaire (A.E.Q.S)
 - Principe de l'étape déterminante
- Réactions complexes avec état stationnaire des composés intermédiaires
- Les réactions en chaîne (à séquence fermée)
 - Mécanisme d'une réaction en chaîne
 - Cinétique d'une réaction en chaîne
- Réactions par stade (à séquence ouverte) : Mécanismes des réactions par stade
- Longueur de la chaîne (λ)

3. Théories cinétiques

- Théorie des collisions moléculaires
- Théorie du complexe activé
- Théorie de l'étape limitante
- Théorie de l'approximation de l'état quasi stationnaire
- Théorie de réactions pseudo-mono moléculaires (Théorie de Lindemann- Hinshelwood)
- Modes d'activation : Activation thermique et Activation photochimique.

4. Catalyse homogène et hétérogène

- Ordre de la réaction par rapport au catalyseur
- Mécanisme de la catalyse homogène

- Catalyse acido-basique
- Catalyse redox
- Catalyse enzymatique
- Réactions hétérogènes : Méthodes d'étude
- Adsorption d'un soluté sur solide
 - Cinétique d'adsorption
 - Cinétique de désorption

Références bibliographiques

- Chemical Kinetics and Dynamics (J. I. Steinfeld, J. S. Francisco, W. L. Hase)
- La Cinétique Chimique (P. Infelta, M. Grätzel)
- Modern Liquid Phase Kinetics (B. G. Cox)
- Cinétique et catalyse, 2e édition (Gérard SCACCHI, Michel BOUCHY, Jean-François FOUCAUT, Orfan ZAHRAA, René FOURNET)

Semestre : 2

UE : Fondamentale

Matière : Techniques d'Analyses Physicochimiques II

Objectifs de l'enseignement

- Connaître le principe et la mise en application de différentes méthodes chromatographiques liquides et gazeuses.
- Connaître le principe et le fonctionnement des principaux spectromètres de masse.
- Savoir interpréter des spectres de masses MS.
- Aborder la spectrométrie de masse à plusieurs dimensions.

Connaissances préalables recommandées :

- Notions données en Licence. Avoir les techniques de séparation.

Contenu de la matière

1. Chromatographie

- Théorie de la chromatographie. Notions de facteur de rétention, sélectivité, résolution, efficacité, diffusions.
- Equation de van Deemter.
- Chromatographie en phase gazeuse : gaz vecteurs, colonnes et phases stationnaires, détecteurs, dérivation, mise au point et optimisation des conditions d'analyse. Exemples de séparation.
- Chromatographie liquide haute performance : instrumentation (solvants, pompes, injecteurs, colonnes, détecteurs). Modes de séparation : exclusion stérique, échange d'ions, adsorption, partage. Pour chaque mode de séparation description des phases stationnaires, des phases mobiles et des facteurs à optimiser lors de l'analyse. Exemples de séparation.
- Introduction à d'autres méthodes séparatives : chromatographie en phase supercritique, électrophorèse capillaire.

3. Spectroscopie de Masse

- Principe
- Techniques d'ionisation moléculaires : EI, CI, FAB, ESI, MALDI
- Interprétation d'un spectre de masse par ionisation électronique (IE)
- Spectres de masse de quelques classes chimiques
- Structure d'un spectromètre de masse
- Utilité de la spectrométrie de masse
- Applications de la spectroscopie de masse à l'analyse moléculaire, la détection de trace, la composition isotopique.
- Couplage GC/MS et LC/MS
- Analyse quantitative en spectrométrie de masse.

3. Les techniques d'analyse chimique locale

- Microanalyse X

On distinguera :

- La microsonde de Castaing (instrument essentiellement destiné à la microanalyse)
- La microanalyse, accessoire des microscopes électroniques à balayage et en transmission.

Cette distinction réside en partie dans la nature du spectromètre de rayons X utilisé :

- La spectrométrie par dispersion de longueur d'onde (WDS) pour la microsonde
- La spectrométrie par sélection en énergie (EDS) pour le MEB et le TEM

4. Techniques de Caractérisation de Surface

- Spectrométrie de photo-électrons (ESCA ou XPS) et d'électrons Auger (*Analyse élémentaire et chimique*)
- Spectrométrie à décharge lumineuse (SDL)
- Spectrométrie d'émission ionique secondaire (SIMS)

Références bibliographiques

- Méthodes instrumentales d'analyse chimique et applications (4^e Éd.) : Les deux volumes ; BURGOT Gwenola, BURGOT Jean-Louis ; LAVOISIER 2006
- Principes d'analyse instrumentale ; Douglas Arvid Skoog, F. James Holler, Timothy A. Nieman ; De Boeck Supérieur 2003.
- La spectrométrie de masse en couplage avec la chromatographie en phase gazeuse, BOUCHONNET Stéphane ; LAVOISIER 2009.

Semestre : 2
UE : Méthodologique
Matière : TP Chimie des Surfaces

Objectifs de l'enseignement :

- Comprendre et quantifier les propriétés des surfaces (tension superficielle, énergie de surface, mouillage) et leur impact sur l'adhésion.
- Maîtriser des techniques expérimentales (goniométrie, tests mécaniques, fonctionnalisation) pour modifier et caractériser des surfaces.
- Relier théorie et applications (colles, revêtements, surfaces modifiées) en explorant l'influence de la chimie et de la topographie des surfaces.

Connaissances préalables recommandées :

- Bases de thermodynamique des surfaces (tension superficielle, énergie libre, mouillage).
- Notions d'adhésion (mécanismes chimiques, physiques et mécaniques).
- Techniques de caractérisation (angles de contact, méthodes mécaniques, analyse spectroscopique FTIR...).

La liste des TP citée ci-dessous n'est pas exhaustive. Elle constitue une orientation d'ordre général et dépendra des ressources disponibles pour chaque établissement :

Contenu de la matière :

- TP1 : Mesure de tension superficielle des liquides par méthodes : goutte tombante, méthode de l'anneau...
- TP 2 : Mesure de l'énergie de surface par la méthode de la goutte sessile
- TP3 : Influence des traitements de surface sur l'adhésion
- TP 4 : Influence de la rugosité sur l'adhésion
- TP 5 Préparation : et caractérisation de surfaces superhydrophobes
- TP 6 : Formulation d'une colle et tests mécaniques
- TP 7 Préparation : et caractérisation de surfaces chimiques modifiées

Semestre : 2
UE : Méthodologique
Matière : TP Chimie-Physique II

Objectifs de l'enseignement

- Apprendre à l'étudiant à manipuler ou à effectuer des analyses spectrales et chromatographiques.

Connaissances préalables recommandées

- Notions acquises dans l'unité fondamentale et en licence.

La liste des TP citée ci-dessous n'est pas exhaustive. Elle constitue une orientation d'ordre général et dépendra des ressources disponibles pour chaque établissement :

Contenu de la matière Selon disponibilité

- TP sur la spectroscopie de masse
- TP sur la spectroscopie d'absorption et d'émission atomique
- Analyse par CPG
- Analyse par HPLC
- Analyse en SAA ou en Colorimétrie.....

Références bibliographiques

- Spectrometrie d'absorption atomique : Applications à l'analyse chimique, Maurice Pinta et Coll, ÉDITEURS MASSON et Cie, Paris, 1971.
- Cours de Chimie Analytique et caractérisation des matériaux. La spectrométrie. Steve Gillet, D. Sc., Website : <http://perso.latribu.com/shagar>.
- L'analyse thermique, A P Rollet; R Bouaziz, Editeur : Paris, Gauthier-Villars, 1972.
- Chimie Analytique (SKOOG, WEST, HOLLER) Edition de Boeck 1997,

Semestre : 2

UE : Méthodologique

Matière : TP Cinétique Chimique

Objectifs de l'enseignement :

- Ces TP permettent de relier « théorie et pratique », en couvrant les concepts clés du programme : lois de vitesse, mécanismes, catalyse et méthodes expérimentales.

Connaissances préalables recommandées :

- Bases de thermodynamique chimique : notions d'enthalpie libre (ΔG , constante d'équilibre.
- Base de la cinétique chimique : loi de vitesse, ordre de réaction et temps de demi-réaction ($t_{1/2}$), loi d'Arrhenius...

La liste des TP citée ci-dessous n'est pas exhaustive. Elle constitue une orientation d'ordre général et dépendra des ressources disponibles pour chaque établissement :

Contenu de la matière :

- TP 1 : Les facteurs influant sur la vitesse d'une réaction chimique (Température et concentration)
- TP 2 : Mécanisme réactionnel et approximation de l'état quasi stationnaire (AEQS)
- TP 3: Cinétique de la décomposition du peroxyde d'hydrogène (H_2O_2) catalysée par des ions métalliques (Fe^{3+}/Cu^{2+})
- TP 4: Cinétique de la réaction de décomposition du *bleu de méthylène* (BM) en présence de glucose et catalyseur (NaOH) – Étude par spectrophotométrie
- TP 5 : Cinétique des réactions en chaîne
- TP 6 : Catalyse homogène (enzymatique ou acido-basique)
- TP 7 : Suivi de la cinétique d'une réaction chimique par titrage
- TP 8 : Suivi de la cinétique d'une réaction chimique par conductimétrie
- TP 9 : Suivi de la cinétique d'une réaction Chimique par spectrophotométrie

Semestre : 2

UE : Méthodologie

Matière : Chimiométrie, Analyse des Données et Plans d'expériences

Objectifs de l'enseignement

L'objectif principal de cet enseignement est de former l'étudiant à une approche rationnelle et méthodique des problèmes expérimentaux. À la fin du semestre, l'étudiant sera capable de :

- *Comprendre les principes de la chimiométrie appliquée aux données expérimentales*
- *Extraire des informations pertinentes et fiables à partir de données chimiques complexes et multivariées*
- *Maîtriser les outils statistiques et mathématiques nécessaires pour exploiter efficacement les résultats expérimentaux*
- *Connaître les différents plans d'expériences et savoir choisir ou concevoir le plan le plus approprié pour modéliser et optimiser un système chimique*

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir des bases solides en statistiques de base, en analyse de données et en chimie analytique.

Contenu de la matière :

1. Fondamentaux de la statistique appliquée à la chimie (3 semaines)

- Statistiques descriptives : moyenne, médiane, variance, écart-type, coefficient de variation
- Lois de distribution : loi normale, histogrammes, boxplots
- Tests d'hypothèses : Student, χ^2 , ANOVA simple
- Intervalles de confiance et niveau de signification (p-value)

2. Régression et modélisation statistique (3 semaines)

- Prétraitements des données : centrage, réduction, normalisation
- Régression linéaire simple et multiple
- Ajustement de courbes, évaluation du modèle (R^2 , RMSE, résidus)
- Sélection de variables : méthodes pas à pas, VIF, critère d'information (AIC)
- Validation croisée

3. Planification des expériences (Design of Experiments – DoE) (2 semaines)

- Définitions et historique
- Classification des plans d'expériences
- Concepts fondamentaux : facteur, réponse, interaction, répétabilité
- Introduction aux plans factoriels complets et fractionnaires (2^k)

4. Plans factoriels complets à 2 niveaux (2^k) (2 semaines)

- Construction : Matrice d'expériences.
- Traitement : Matrice de calcul des effets.
- Etude statistique : Régression linéaire, erreurs, tests des effets, analyse de variance (ANOVA) & construction de modèles empiriques.
- Optimisation & Validation.
- Exemples d'applications en TP - Logiciels : JMP, Statgraphics, Modde,... : Procédés de polymérisation : synthèse & caractérisation ; Chimie macromoléculaire : Compoundage préalable à la mise en œuvre des polymères ; Formulations inorganiques, etc.

5. Plans centraux composites à 2 niveaux (2 semaines)

- Construction : matrice d'expériences
- Traitement : matrice de calcul des effets
- Étude statistique : régression, erreurs, tests des effets, ANOVA
- Modélisation empirique, optimisation et validation
- Exemples d'applications en TP avec logiciels (JMP, Statgraphics, Modde, etc.)

6. Autres plans d'expériences (3 semaines)

- Plan fractionnaire / Plan de criblage.
- Plan de mélange.
- Exemples d'applications en TP : Analyse de données réelles de chimie des matériaux (formulation, ...) : Choix d'un plan d'expérience, collecte/simulation de données, modélisation, interprétation.
- Rédaction d'un rapport synthétique des résultats des plans d'expériences.

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

- Jacques Goupy : *Les plans d'expériences : Optimisation du choix des essais et de l'interprétation des résultats* – Dunod, 5ème édition, 2017
- Sado, G., & Sado, M. C. : *Les plans d'expériences – De l'expérimentation à l'assurance qualité* – Afnor, 2000
- Tinsson, W. : *Plans d'expériences : constructions et analyses statistiques* – Springer Science & Business Media, 2010
- Goupy, J., & Creighton, L. : *Introduction aux plans d'expériences* – Hachette, 3ème édition, 2006
- Driesbeke, J. J., Fine, J., & Saporta, G. (Eds.) : *Plans d'expériences : applications à l'entreprise* – Editions Technip, 1997
- Linder, R. : *Les plans d'expériences : un outil indispensable à l'expérimentateur* – Presses des Ponts, 2005

Semestre : 2

UE : Méthodologie

Matière : Intelligence artificielle et Machine Learning 2

Objectifs de l'enseignement

L'objectif de cet enseignement est d'approfondir les notions d'apprentissage automatique en introduisant des concepts avancés tels que l'apprentissage profond, les réseaux neuronaux, les modèles génératifs et les techniques d'interprétation. À travers ce cours, l'étudiant sera capable d'utiliser ces outils pour la découverte et la conception de nouveaux matériaux dans le domaine des sciences des matériaux.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé les bases de l'apprentissage automatique, du langage Python ainsi qu'une compréhension basique des structures atomiques et cristallines.

Contenu de la matière :

1. Modèles basés sur les graphes dans les sciences de la matière (3 semaines)

- Les matériaux sont des graphes : atomes = nœuds, liaisons = arêtes.
 - Réseaux convolutionnels de graphes de cristaux (CGCNN).
 - Étude de cas : Prédiction des énergies de formation
2. Chapitre 2 : Modèles génératifs pour la conception de matériaux (3 semaines)

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.

3. Évaluation des modèles et interprétabilité (2 semaines)

- Techniques d'évaluation des modèles d'apprentissage profond
- Validation croisée, détection du surajustement (overfitting)
- Interprétabilité des modèles : SHAP, LIME

4. Techniques avancées de Machine Learning (3 semaines)

- Modèles d'ensemble : Random Forests, XGBoost, LightGBM
- Algorithmes avancés de régression et de classification
- Réduction de la dimensionnalité : Analyse en Composantes Principales (ACP), t-SNE, UMAP

5. Applications avancées en sciences des matériaux (3 semaines)

- Conception inverse assistée par IA pour la découverte de matériaux
- Prédiction des propriétés avancées : modules élastiques, température critique de supraconductivité
- Modélisation multi-échelle : couplage entre IA, dynamique moléculaire et théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

6. Mini-projet de spécialisation (Capstone Project) (3 semaines)

- 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
- Mode d'évaluation

Outils et bibliothèques utilisés :

- Langage de programmation : Python
- Environnements : Jupyter Notebooks
- Bibliothèques : TensorFlow, PyTorch

- Outils spécifiques : Matminer, Pymatgen

Références (Livres et polycopiés, sites internet, etc.) :

- Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, Aaron Courville: *Deep Learning* – MIT Press, 2016
- François Chollet: *Deep Learning with Python** – Manning Publications, 2017
- D. K. Jha, T. Chen, M. Tan, H. Chen: *Machine Learning in Materials Science* – Springer, 2018
- Kristin Persson et al.: *Data Science for Materials Discovery* – CRC Press
- Rajiv S. Mishra: *Materials Informatics: Methods, Tools, and Applications* – Elsevier

Semestre : 2

UE : Découverte

Matière : Recyclage et Cycle de Vie des Matériaux

Objectifs de l'enseignement :

- Cette unité d'enseignement vise à comprendre et analyser les enjeux environnementaux, économiques et techniques liés à la gestion des matériaux tout au long de leur cycle de vie.

Connaissances préalables recommandées :

- La classification des matériaux.
- Les mécanismes de corrosion/dégradation
- Bases de statistiques

Contenu de la matière :

- Utilisation et dégradation des matériaux
- Durée de vie de différentes classes de matériaux
- Récupération et le taux de recyclage
- Impact environnemental et les normes requises

Références bibliographiques :

- Ashby, M. F. (2013). *Materials and the Environment: Eco-Informed Material Choice* (2nd ed.). Elsevier.
- Graedel, T. E., & Allenby, B. R. (2010). *Industrial Ecology and Sustainable Engineering*. Pearson. Journal of Cleaner Production (Elsevier)
- Fontana, M. G. (2005). *Corrosion Engineering*. McGraw-Hill.

Semestre : 2

UE : Découverte

Matière : Semi-conducteurs et Applications

Objectifs de l'enseignement

- Ce cours permet à l'étudiant d'acquérir les notions générales des matériaux inorganiques
- Connaissances approfondies sur les matériaux semi-conducteurs et leurs propriétés physicochimiques à savoir leurs applications en énergétiques et nanotechnologies.

Connaissances préalables recommandées

- Chimie théorique, propriétés des matériaux, physique et chimie des semi-conducteurs.

Contenu de la matière

1. Notions générales

- Caractéristiques physiques des semi-conducteurs
- Quels Matériaux pour quel type d'applications

2. Propriétés électriques des semi-conducteurs

- **Structure électronique et bande interdite (2 semaines)**
- Modèle des bandes : métal, semi-conducteur, isolant.
- Effet des dopants et défauts sur les propriétés électroniques.
- Bande interdite directe vs indirecte.
- **Semi-conducteurs classiques et nouveaux matériaux (2 semaines)**
- Silicium, germanium, GaAs, GaN, SiC.
- Jonctions p-n, hétérojonctions.
- Matériaux bidimensionnels (graphène, TMDs), pérovskites halogénées.
- **Oxydes transparents conducteurs (TCO) (2 semaines)**
- Exemples : ITO, AZO, ZnO:Al.
- Mécanisme de conduction et transparence optique.
- Jonctions p-n, hétérojonctions, homojonctions,
- Applications : écrans tactiles, cellules solaires, OLEDs.

3. Applications

- Etudes des comportements photo électrochimiques des Semi-conducteurs sous Lumière
- Diodes électroluminescentes (LEDs)
- Cellules photovoltaïques (silicium, pérovskites, CIGS...)
- Capteurs optiques et détecteurs
- Transistors dans les circuits intégrés

Références

- Mercier, Jean P., Gérald Zambelli, and Wilfried Kurz. Introduction à la science des matériaux. Vol. 1. PPUR presses polytechniques, 1999.
- Lévy, Francis. Physique et technologie des semiconducteurs. Vol. 18. PPUR presses polytechniques, 1995.
- Guillien, R. (1978). Les semiconducteurs et leurs applications. FeniXX. Delaire, Jacques, et al. Photophysique et photochimie : Des fondements aux applications. EDP sciences, 2017.
- Dauvin, Jean-Philippe. *Les semi-conducteurs*. FeniXX, 1990.

Semestre : 2

UE : Découverte

Matière : **Matériaux Moléculaires**

Objectifs de l'enseignement

Connaissances préalables recommandées

Contenu de la matière

1. Elaboration de nanostructures conjuguées : Approche Bottom –up

- Intérêt des matériaux organiques conjugués
- Grande diversité d'applications :
- Propriétés électroniques. Propriétés optiques. Propriétés opto-électroniques
- Rappel des outils de synthèse
- Couplages organométalliques
 - o Couplage croisé Ar-Ar'
 - o Couplage de Negishi
 - o Couplage de Kumada-Corriu
 - o Couplage de Stille
 - o Couplage de Sonogashira
- Approches synthétiques non contrôlées d'oligomères conjugués
- Approches synthétiques contrôlées d'oligomères conjugués
- Approche itérative convergente divergente
- Synthèse itérative convergente divergente d'oligomère fonctionnalisée par des « alligator clips »
- Synthèse itérative d'oligomère Croissance bidirectionnelle
- Synthèse itérative divergente convergente d'oligomère sur support
- Synthèse itérative divergente convergente d'oligomère sur support : triplement de la croissance de la chaîne

2. Applications

- Electronique organique : impact
- Cellules photovoltaïques organiques
- Transistors organiques à effet de champ (OFET)
- Matériaux Organiques Conjugués Chiraux : Propriétés optiques : fluorescence
- Matériaux Organiques Conjugués Chiraux : Propriétés optiques : électroluminescence
- Diodes électroluminescentes organiques
- Organisation supramoléculaire
- Importance de l'organisation supramoléculaire des systèmes π -conjugués sur les propriétés optiques et opto-électroniques
- Circuits moléculaires logiques
- Traitement de l'information au niveau moléculaire : Portes logiques

Semestre : 2

UE : Découverte

Matière : Chimie Verte

Objectifs de l'enseignement :

La chimie verte englobe donc la conception, le développement et l'élaboration des produits et procédés chimiques pour réduire ou éliminer l'usage et la génération des substances dangereuses pour la santé et l'environnement.

Connaissances préalables recommandées :

Connaissances de base sur la chimie

Contenu de la matière :

1. Généralités sur la chimie verte

- Problématiques liées à l'environnement
- Problématiques liées à la durabilité
- Définition de la chimie verte
- Principaux domaines d'application de la chimie verte
- Les douze principes de la chimie verte

2. Réactivité et chimie verte

- Concept de la chimie verte : historique, définition, objectifs
- Outils utilisés pour une chimie de synthèse propre
- Synthèses industrielles polluantes re-adaptées au concept de la chimie verte.
- Les solvants et leurs propriétés, la solubilité des substances ioniques
- Les différentes réactions en chimie inorganique ; exemples d'applications pour le développement durable

3. La chimie des métaux : exemple des métaux lourds

Références bibliographiques

- Chimie verte de Paul Colonna nov 2005
- Guide de la Chimie Verte 2015
- Chimie du végétal, process, bio et nano-technologies, équipements et services
- Chimie verte : concepts et applications, Jacques Augé, Marie-Christine Scherrmann (Livres et photocopiés, sites internet, etc).

Semestre 2

Intitulé de l'unité : Transversale

Intitulé de la matière : Exploration de logiciels libres et open source en Chimie Physique

Objectifs de l'enseignement :

- Familiariser les étudiants avec les outils open source utilisés pour modéliser, analyser et interpréter des phénomènes physico-chimiques.
- Intégrer les logiciels à l'étude de la thermodynamique, l'électrochimie, la cinétique chimique et les techniques de caractérisation.
- Développer des compétences transversales en simulation, traitement de données et modélisation moléculaire.

Connaissances préalables recommandées :

- Bases en thermodynamique, chimie quantique, électrochimie et méthodes spectroscopiques.
- Connaissance élémentaire en Python ou autres environnements de calcul scientifique.
- Familiarité avec les données expérimentales et la représentation graphique.

Programme pédagogique détaillé :

Chapitre I. Introduction aux logiciels scientifiques open source

- Enjeux et avantages du libre accès
- Logiciels utilisés : Avogadro, ORCA, Scilab, GNU Octave, Chemtool, Psi4, Fityk, QtiPlot

Chapitre II. Visualisation et modélisation moléculaire

- Construction de molécules et optimisation de géométrie avec Avogadro
- Visualisation de l'orbitales, densité électronique, surfaces d'énergie potentielle
- Exportation vers les logiciels de calcul quantique (ORCA, Psi4)

Chapitre III. Chimie quantique et calculs ab initio

- Introduction à Psi4 et ORCA pour les calculs DFT/HF
- Calculs de spectres IR, UV-Vis, et de propriétés électroniques
- Étude de la réactivité à travers les orbitales frontières (HOMO-LUMO)

Chapitre IV. Électrochimie et cinétique

- Modélisation de systèmes électrochimiques simples (équilibres rédox, courbes I-E)
- Simulation de cinétiques de réactions chimiques (logiciels Python/Scilab)
- Interprétation des données issues d'expériences de voltampérométrie

Chapitre V. Analyse de données physicochimiques

- Traitement des données spectrales (FTIR, UV, Raman) avec Fityk

- Ajustements, déconvolutions, extractions de pics
- Utilisation de QtiPlot pour la représentation et modélisation mathématique des données expérimentales

Chapitre VI. Mini-projet appliqué

- Projet individuel ou en binôme : interprétation de données expérimentales ou modélisation d'un phénomène physico-chimique
- Rapport de projet avec figures et commentaires scientifiques

Références recommandées :

1. Psi4: <https://psicode.org/>
2. ORCA Quantum Chemistry: <https://orcaforum.cec.mpg.de/>
3. Avogadro: <https://avogadro.cc/>
4. Fityk: <https://fityk.nieto.pl/>
5. QtiPlot: <https://www.qtiplot.com/>
6. Scilab: <https://www.scilab.org/>
7. GNU Octave: <https://www.gnu.org/software/octave/>

Programme détaillé par matière du semestre S3

UE : Fondamentale

Matière : Electrochimie Appliquée

Objectifs de l'enseignement :

- Comprendre les fondements physico-chimiques et les applications analytiques de l'électrochimie.
- Maîtriser les techniques électrochimiques pour caractériser des systèmes redox et découvrir les grandes applications industrielles de l'électrochimie.

Connaissances préalables recommandées :

- Connaissances préalables en chimie physique et électrochimie.

Contenu de la matière :

1. Corrosion et protection

- Mécanismes électrochimiques de la corrosion.
- Techniques de caractérisation de la corrosion (courbes de polarisation, EIS).
- Protection anodique, cathodique, revêtements passivants

2. Électrodéposition et modification de surface

- Cinétique de l'électrodépôt, surpotentiel, croissance des couches. Paramètres : pH, température, courant, potentiel
- Techniques de suivi électrochimique : Potentiométrie (courant nul et imposé). Ampérométrie Voltampérométrie linéaire et cyclique.
- Applications industrielles : Galvanisation, électrozingage, galvanoplastie (Cu, Ni, Ag, Au)
- Hydrométallurgie : Lixiviation, cémentation, électroobtention, électroraffinage. Co-déposition (Ni-Co, Cu-Zn...)
- Traitements de surface électrochimiques

3. Electrochimie des semiconducteurs et des réactions photoélectrochimiques

- **Notions sur l'électrochimie des semi-conducteurs**
- Bases de l'électrochimie des semi-conducteurs
- La relation de Mott-Schottky
- Quelques applications
- **Réactions photoélectrochimiques**
- Introduction
- Processus électrochimiques et photoélectrochimiques aux électrodes semiconductrices
- Exploitation des processus photoélectrochimiques
- Photoélectrolyse et électrolyse photoassistée

4. Electrochimie des solides

- **Transport ionique dans les cristaux ioniques**
- Mobilité électrochimique
- Conductivité électrique et nombre de transport
- **Transport ionique dans les cristaux.**
- Mobilité électrique
- Conductivité ionique

1. Electrochimie, Micro et Nanostructures

- **L'électrochimie comme outil d'élaboration de nanostructures**
- Électrodéposition de nanostructures métalliques
- Couches monomoléculaires
- Micro- et nano-usinage

- Couches d'oxyde poreuses
- Semi-conducteurs poreux
- **L'électrochimie comme outil d'étude de nanostructures**
- Microscopies à l'interface électrochimique
- Nanoparticules métalliques ; blocage de Coulomb
- Nanoparticules semi-conductrices ; effets quantiques

Références bibliographiques

- Allen J. Bard, Larry R. Faulkner, « Électrochimie : principes, méthodes et applications », Ed. Masson 1983.
- G. Barral, B. Le Gorrec, C. Montella, "Cours et exercices : Notions élémentaires sur les cellules électrochimiques", Grenoble (2003).
- Jean Besson, « L'électrochimie, Ed. PUF, Paris, 1979.
- Jean Besson, J. Guitten, "Manipulations d'électrochimie - Introduction à la théorie et à la pratique de la cinétique électrochimique", Ed. Masson – Paris, 1972.
 - Jean Besson, "Précis de thermodynamique et de cinétique électrochimiques", Ed. Ellipses-Marketing, Paris, 1984.
 - Michel Chemla, "*Chimie Physique - Tome 2 : Électrochimie, cinétique chimique, états de la matière*", Éd. Dunod
 - Didier Devilliers, "De la chimie des solutions à l'électrochimie – Thermodynamique et cinétique électrochimiques", Ed. Ellipses 2020.
 - Didier Devilliers, E. Mahé, "Cours : Cellules électrochimiques : aspects thermodynamiques et cinétiques - Applications aux générateurs et aux électrolyseurs industriels, (2003).

UE : Fondamentale

Matière : Thermodynamique Statistique

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 :

1. Fondements et Introduction

- **Rappels thermodynamiques**
- Lois de la thermodynamique
- Potentiels thermodynamiques
- Limites de l'approche macroscopique
- **Principes de base**
- Hypothèse ergodique
- Moyennes temporelles vs moyennes d'ensemble
- Échelles de description (micro/macro)
- **Notion d'ensemble statistique**
- Définition mathématique
- Espace des phases
- Exemples concrets (gaz parfait, solide magnétique)

2. Théorie des Ensembles

- **Ensemble microcanonique**
- Systèmes isolés (N, V, E fixes)
- Définition de l'entropie statistique
- **Ensemble canonique**
- Fonction de partition Z
- Distribution de Boltzmann
- Énergie libre et grandeurs dérivées
- **Ensemble grand-canonique**
- Potentiel chimique
- Fonction de partition grand-canonique
- Applications aux systèmes ouverts
- **Ensemble isotherme-isobare**
- Fonction de partition isobare
- Enthalpie libre
- Exemple des transitions de phase

3. Applications aux Systèmes Classiques

- **Gaz parfaits classiques**
- Théorème d'équipartition
- Distribution de Maxwell-Boltzmann
- Capacité calorifique
- **Systèmes dilués réels**
- Équation de van der Waals
- Théorie du champ moyen
- Potentiels intermoléculaires

4. Extension Quantique

- **Fondements quantiques**
- Opérateur densité
- Fonction de partition quantique
- Limite classique et correction de Gibbs
- **Statistiques quantiques**
- Fermions vs Bosons
- Gaz de Fermi parfait (électrons, température de Fermi)
- Gaz de Bose parfait (condensation BEC)

Références bibliographiques :

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

UE : Fondamentale

Matière : Nanomatériaux pour le Développement Durable

Objectifs de l'enseignement

L'objectif de cet enseignement est de développer une expertise dans les nanomatériaux utilisés dans les domaines de l'énergie, l'environnement et la santé. À travers ce cours, l'étudiant acquerra des connaissances sur la conception, la caractérisation, la fabrication et les applications des nanomatériaux dans divers secteurs liés au développement durable.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé les bases des nanosciences et nanotechnologies, chimie des matériaux, électrochimie ainsi que les propriétés physico-chimiques des matériaux.

Contenu de la matière :

1. Introduction – Contexte actuel (2 semaines)

- Contexte énergétique
- Contexte actuel des nanosciences et nanotechnologies dans le domaine des énergies

2. Méthodes de réalisation de nanostructures (6 semaines)

- Synthèse et fonctionnalisation de nano-objets
 - Synthèse par voie chimique en solution
 - Obtenir des nanoparticules individuelles – fonctionnalisation
 - Nano-objets organiques
- Approche bottom up (vers le haut)
 - Synthèses en solution par voie chimique ou électrochimique, avec ou sans template
 - Synthèses en phase vapeur – réacteur sous vide ou atmosphère contrôlée
- Approche top-down (vers le bas) :
 - Nanostructuration de couches minces (techniques de lithographie, gravure).
 - La lithographie (Haute technologie, miniaturisation des composants électroniques et informatiques, ...),
 - La nanoélectronique au service de l'homme et la loi de Moore

3. Nanomatériaux pour l'énergie et le développement durable (10 semaines)

- Introduction : Les nanomatériaux sont en plein essor dans le domaine de la recherche scientifique et technique en raison de leurs nombreuses applications innovantes, qu'elles soient physiques, chimiques ou biologiques.
- Nanomatériaux pour la conversion de l'énergie
 - Conversion photovoltaïque de l'énergie solaire – état des technologies et évolutions
 - Matériaux semi-conducteurs – généralités
 - Jonction P-N
 - Cellule solaire photovoltaïque – principe de base
 - Module photovoltaïque
 - Différentes filières : silicium, couche mince, organique
 - Apport des nanotechnologies : Vers les cellules photovoltaïques à base de nanomatériaux inorganiques
 - Cellules solaires à multi-jonctions ou tandem
 - Cellules solaires à niveaux intermédiaires
 - Cellules solaires à multi-génération de charges

- Cellules à conversion photonique
- Cellules solaires à porteurs chauds
- Nanomatériaux pour le stockage de l'énergie
 - Piles à combustible
 - Différentes technologies
 - Principes thermodynamiques de base
 - Piles à membrane échangeuse de protons
 - Piles à oxyde solide
 - L'hydrogène
 - Hydrogène comme vecteur énergétique
 - Production de l'hydrogène – différentes voies
 - Stockage de l'hydrogène – matériaux solides et composites nanostructurés
 - Avancées technologiques dans la production et le stockage de l'hydrogène
- Nanomatériaux pour l'environnement
 - Applications pour le traitement de l'eau et de l'air
 - Remplacement des filtres conventionnels par des nanomatériaux avancés
- Nanomatériaux pour la santé

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

- Abdelilah Slaoui, Jean-François Guillemoles : **Nanomatériaux pour la conversion photovoltaïque** – *L'Actualité Chimique*, n° 331, juin 2009
- Florent Bègue, Éric Pineault : **L'hydrogène : énergie de transition ou nouveau mirage ?** – *Relations*, été 2022
- Abdelilah SLAOUI : **Nanostructures pour cellules photovoltaïques inorganiques** – *Techniques de l'Ingénieur*, 10/08/2010
- Daniel Lincot, Ludovic Escoubas, Jean François Guillemoles, Jean-Jacques Simon, Abdelilah Slaoui : **Nanomatériaux pour la conversion photovoltaïque de l'énergie solaire**

Semestre : 3

UE : Fondamentale

Matière : Méthodes de Caractérisation des Matériaux

Objectifs de l'enseignement :

- Présenter les principes et l'application de techniques majeures pour l'étude et la caractérisation de matériaux et des nanostructures.
- Techniques spectroscopiques et microscopiques pour la caractérisation des matériaux

Connaissances préalables recommandées :

- Connaissances préalables sur les nanosciences et nanotechnologie, chimie et physique des matériaux, électrochimie, propriétés physicochimiques des matériaux.

Contenu de la matière :

1. Diffraction de rayons X

- **Introduction**
- Présentation des états cristallins et amorphes. Interaction des RX avec la matière.
- Production des RX
- Diffraction des RX. Condition d'apparition du phénomène de diffraction.
- Les techniques de diffraction de RX.
- **Diffraction sur poudre**
 - Aspects expérimentaux en diffraction des rayons X par les poudres (Chambres, diffractomètre ; préparation de l'échantillon ; facteurs influençant les principales
 - Enregistrement d'un diagramme de diffraction X sur poudre
 - Conditions d'enregistrements
 - Données obtenues
 - Exploitation d'un diagramme de diffraction de poudre
 - Recherche de pics
 - Décomposition du diagramme
 - Affinement de profil de raie
 - Affinement de profil total
 - Recherche de maille
 - Modélisation des diagrammes de diffraction : fonctions analytiques, méthodes de décomposition, méthode de Rietveld.
- **Les méthodes du monocristal**
 - Méthode de Lauë
 - Méthode du cristal tournant
 - Méthode de Weissenberg
 - Méthode de précession

3. Microscopies à sonde atomique : Microscopies en champ proche (AFM, STM, ...)

Ce chapitre présente une introduction aux méthodes de la visualisation et la caractérisation d'objets de dimension nanométrique :

- Le microscope à effet tunnel (STM)
- Le microscope à force atomique (AFM)

4. Microscopies à faisceau d'électrons (MET, MEB, ...) et microanalyse EDS

- Principes de fonctionnement du MEB.
- Formation de l'image et modes de détection. Micro-analyse X (EDS/EDX) : principes et applications pour l'analyse élémentaire locale.
- Préparation des échantillons pour le MEB.
- Principes de fonctionnement du MET. Formation de l'image et modes de contraste (diffraction, masse-épaisseur).
- Techniques complémentaires (diffraction électronique, analyse chimique par spectroscopie électronique par perte d'énergie EELS).

- Préparation des échantillons pour le MET (amincissement).
- Microscopie électronique à haute résolution (utilisation des diaphragmes, contraste et Interprétation des images).

5. Caractérisations optiques et électriques

- Spectroscopie de Photoluminescence : Principes et applications
- Spectroscopie Raman : Principes et applications
- Détermination du Gap optique à partir des spectres UV-Vis
- Caractérisation électrique : mesure de la conductivité et effet Hall

Références bibliographiques

- Williams, D. B., & Carter, C. B. (2009). *Transmission Electron Microscopy: A Textbook for Materials Science* (2nd ed.). Springer. :
- Goldstein, J. et al. (2017). *Scanning Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis* (4th ed.). Springer:
- Cullity, B. D., & Stock, S. R. (2014). *Elements of X-Ray Diffraction* (3rd ed.). Pearson.

Semestre : 3

UE : Méthodologie

Matière : Modélisation Moléculaire

Objectifs de l'enseignement :

- Maîtrise les outils mathématiques et informatiques pour la résolution de problèmes de modélisation et Exploration des méthodes de modélisation moléculaire (mécanique moléculaire, dynamique moléculaire).
- Aussi, l'évaluation des formalismes, leurs implications physiques, et les compromis coût/précision.

Connaissances préalables recommandées :

- Bases en mathématiques et en programmation. Connaissances fondamentales en chimie et physique (thermodynamique, mécanique quantique).

Contenu de la matière :

- 1. Introduction à la modélisation moléculaire**
 - Intérêt et domaines d'application
 - Définitions et enjeux
- 2. Rappels de chimie quantique appliquée**
 - Mécanique moléculaire (MM) et champs de force
 - Méthodes semi-empiriques (PM3, AM1)
 - Hartree–Fock
 - Théorie DFT)
- 3. Analyse électronique des molécules et prédiction de la réactivité (Optimisation géométrique et états de transition)**
- 4. Diagramme de Jablonski**
 - Etats électroniques
 - Fluorescence et phosphorescence
- 5. Modélisation des inhibiteurs de corrosion**
 - Indices quantiques
 - Mécanismes d'adsorption
- 6. Modélisation de l'effet du solvant**

Travaux Pratiques

- TP 1 : Prise en main des logiciels de modélisation (ORCA, Gaussian, etc.). Installation, visualisation de structures, préparation des fichiers d'entrée.-
- TP 2 : Modélisation des propriétés électroniques d'une molécule. Calcul de l'énergie totale, des charges atomiques, du moment dipolaire, de la polarisabilité et de la carte du potentiel électrostatique moléculaire (MEP).
- TP 3 : Analyse des descripteurs de réactivité locale. Calcul des indices de Fukui (f^+ , f^- , f^0), dualité de réactivité, etc. et interprétation des sites nucléophiles et électrophiles.
- TP 4 : Étude des descripteurs de réactivité globale. Évaluation des orbitales HOMO–LUMO, du gap énergétique, du potentiel chimique, de la dureté, de la mollesse et de l'affinité électronique, etc.
- TP 5 : Simulation spectroscopique IR et UV-Visible. Construction du diagramme de Jablonski, simulation des transitions électroniques, identification des états excités.
- TP 6 : Prédiction computationnelle de la réactivité dans une réaction de Diels–Alder. Analyse des paramètres thermodynamiques et orbitales d'une réaction asymétrique.
- TP 7 : Étude théorique de la régiosélectivité selon la règle de Markovnikov. Prédiction du produit majoritaire via des calculs quantique et analyse de la stabilité des intermédiaires.
- TP 8 : Modélisation de l'efficacité d'inhibiteurs de corrosion. Calculs des descripteurs de réactivité et interactions possibles avec des surfaces métalliques.
- TP 9 : Étude des mécanismes de photoluminescence dans les composés organiques. Identification

des transitions radiatives, analyse des états singulets et triplets.

- TP 10 : Conception moléculaire de diodes électroluminescentes organiques (OLEDs). Optimisation géométrique, simulation des propriétés électroniques et prédiction de l'efficacité lumineuse.

Références bibliographiques :

- Molecular modelling: principles and applications; Author Andrew Leach; Publisher: Prentice Hall; 2001.
- Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models; Author Christopher J. Cramer; Publisher: John Wiley & Sons; 2002.
- Fundamentals of materials for energy and environmental sustainability, Author(s): D S Ginley; Dayid Kahen; Cambridge University Press; 2012.
- Highly Efficient OLEDs with Phosphorescent Materials; Author(s): Hartmut Yersin; Publisher: Wiley; 2007.
- Eco-Friendly Corrosion Inhibitors: Principles, Designing and Applications; Author(s): Lei Guo, Chandrabhan Verma, Dawei Zhang; Publisher: Elsevier; 2022

Logiciels Open Source pour la chimie computationnelle

- ORCA (semi-open source) **Site** : [ORCA Archives - FACCTs](https://orca-archive.org/)
- NWChem: **Site** : <https://nwchemgit.github.io>
- Psi4: **Site** : <https://psicode.org>
- xTB (GFN-xTB): **Site** : <https://github.com/grimme-lab/xtb>
- Avogadro (interface 3D + plugin de calculs) : **Site** : <https://avogadro.cc>
- WebMO (interface web, version gratuite disponible) : **Site** : <https://www.webmo.net>
- CP2K: **Site** : <https://www.cp2k.org>

Semestre : 3

UE : Méthodologie

Matière : [TP Thermodynamique statistique par logiciel open source](#)

Semestre : 3

UE : Méthodologie

Matière : TP Synthèse des Matériaux

Objectifs de l'enseignement :

- Objectif de ce travail pratique est de donner quelques éléments de base pour mieux comprendre les propriétés physiques et structurales des matériaux nanostructurés et en couches minces déposées par électrodéposition.

Connaissances préalables recommandées

- Connaissances avérées en électrochimie, électrodéposition, techniques d'élaborations des couches minces, techniques bain chimiques, techniques d'épitaxie par jet moléculaires

La liste des TP citée ci-dessous n'est pas exhaustive. Elle constitue une orientation d'ordre général et dépendra des ressources disponibles pour chaque établissement :

Contenu de la matière :

- TP 1 : Elaboration par électrodéposition de couches minces à base de métaux de transition (Ni, Co, Fe)
- TP 2 : Elaboration par bain chimique des nanostructures à base des semi-conducteurs II-VI (ZnO-ZnS).
- TP 3 : Elaboration des nanostructures à base d'oxyde de zinc (ZnO) et d'oxyde de cuivre (Cu₂O) par électrodéposition.
- TP 4: Dopage par voie électrochimique de (ZnO): ZnO par Al (AZO), ZnO par Mg (MGO), dopage des nanostructures de Cu₂O (naturellement p) par l'ions Chlorure Cl⁻ pour changer sa conductivité vers n (n- Cu₂O).
- TP 5 : Synthèse de ZnO, Cu₂O, des hétérojonctions de p-Cu₂O/n-ZnO et de homojonctions p-Cu₂O/n- Cu₂O par électrodéposition et bain chimique.
- TP 6 : Elaboration hydrothermale des oxydes métalliques semiconducteurs

Autres TP :

- TP : Voie solide
- TPs : Méthodes de la chimie douce :
 - *Co-précipitation*
 - *Sol-gel*
 - *Citrate*
 - *Nitrate*
- TP Méthodes sèches (classiques)
- TP Méthodes céramiques
- TP : Elaboration hydrothermale des oxydes métalliques semiconducteurs (TCO)
- TP : Elaboration de nanopoudres d'oxyde de zinc (ZnO) par voie hydrothermale
- TP : Elaboration de SnO₂ par la méthode sol-gel
- TP : Elaboration de poudres de TiO₂ par la méthode sol-gel modifiée
- TP : Elaboration de couches minces de ZnS par la méthode de dépôt par bain chimique (CBD)
- TP : Préparation d'un matériau composite organique/inorganique

Semestre : 3

UE : Méthodologie

Matière : TP Caractérisation des Matériaux

Objectifs de l'enseignement :

- Objectif de ce travail pratique est de donner quelques éléments de base pour mieux comprendre les propriétés physiques et structurales des matériaux nanostructurés et en couches minces déposées par électrodéposition.

Connaissances préalables recommandées

- Connaissances avérées en électrochimie, électrodéposition, techniques d'élaborations des couches minces, techniques bain chimiques, techniques d'épitaxie par jet moléculaires

La liste des TP citée ci-dessous n'est pas exhaustive. Elle constitue une orientation d'ordre général et dépendra des ressources disponibles pour chaque établissement :

Contenu de la matière :

- TP 1 : Estimation de la concentration en porteurs de charges des oxydes conducteurs transparents par la technique de Mott-Schottky.
- TP 2 : Observation morphologique par microscopie à force atomique (AFM) des oxydes conducteurs transparents.
- TP 3 : Mesures optiques par UV-VIS-NIR
- TP 4 : Mesure du coefficient d'absorption et du gap optique.
- TP 5 : Mesure de la résistivité
- TP 6 : Mesure de l'épaisseur des dépôts
- TP 7 : Caractérisation structurale par diffraction de rayons X (DRX) des oxydes conducteurs transparents (ZnO et Cu₂O).
- TP 8 : Caractérisation de la photoactivité des oxydes métalliques transparents et semi-conducteurs

Travaux pratiques avec des logiciels libres et open source

TP 1 – Visualisation des structures cristallines avec VESTA

Objectifs :

- Lire un fichier CIF (Crystallographic Information File).
- Visualiser la maille cristalline, les plans cristallographiques (hkl).
- Calculer les distances interatomiques, angles, et volumes de maille.

Activités :

- Ouvrir plusieurs fichiers CIF (NaCl, graphite, quartz...).
- Afficher les plans (100), (110), (111).
- Représenter les polyèdres de coordination.
- Exporter des images annotées.

TP 2 – Interprétation d'un diffractogramme RX simulé

Objectifs :

- Comprendre les pics de diffraction.
- Identifier les plans (hkl) associés aux pics.
- Vérifier la loi de Bragg.

Activités :

- Utiliser des diffractogrammes simulés (ex. poudre de NaCl, graphite).
- Associer chaque pic à un plan cristallin.
- Vérifier que les positions angulaires obéissent à la loi de Bragg.

Logiciels :

- WinPlotr (pour visualiser les fichiers. xy)
- VESTA (pour superposer les plans hkl)

- **TP 3 – Raffinement de structure avec FullProf (Rietveld)**

Objectifs :

- Apprendre à utiliser FullProf pour raffiner une structure à partir de données expérimentales.
- Obtenir les paramètres de maille, la qualité du fit (R_{wp} , χ^2 ...).

Activités :

- Charger un fichier expérimental de diffraction (poudre).
- Créer le fichier .pcr avec EdPCR.
- Ajuster les paramètres de maille, facteur d'échelle, largeur des pics.
- Interpréter les résultats du raffinement.

- **TP 4 – Identification de phase à partir d'un diffractogramme inconnu**

Objectifs :

- Identifier une phase inconnue à partir de données expérimentales.
- Utiliser les bases de données de diffraction (ICSD, COD).

Activités :

- Recevoir un fichier de diffraction (poudre) inconnu.
- Simuler des diffractogrammes de candidats avec FullProf.
- Comparer les pics, trouver la meilleure correspondance.
- Justifier l'identification.

- **TP 5 – Influence de la structure cristalline sur le motif de diffraction**

Objectifs :

- Comparer les diffractogrammes de différentes structures cristallines.
- Comprendre l'effet de la symétrie et du type de maille (cubic, tetragonal, hexagonal...).

Activités :

- Comparer NaCl (cubique), graphite (hexagonal), rutile-TiO₂ (tétragonal).
- Simuler les diffractogrammes à partir des fichiers CIF.
- Identifier les effets de la symétrie sur l'intensité et la position des pics.

Autres Logiciels Libres

- **TP1 : Introduction aux logiciels de visualisation cristalline (VESTA, Mercury)**

- Visualisation de structures cristallines
- Identification des éléments de symétrie
- Construction de plans réticulaires

- **TP2 : Simulation de diagrammes de diffraction**

- Utilisation de logiciels comme PowderCell ou WinPlotr
- Prédiction des pics de diffraction
- Influence de la maille et de la longueur d'onde

- **TP3 : Analyse de diagrammes de diffraction de poudres**

- Indexation des pics
- Détermination du système cristallin
- Calcul des paramètres de maille

- **TP4 : Raffinement par la méthode de Rietveld**

- Utilisation de logiciels comme FullProf ou TOPAS
- Affinement des paramètres de structure
- Analyse des résidus et qualité du modèle

- **TP5 : Manipulation sur diffractomètre de laboratoire**

- Préparation des échantillons (poudre)

- Acquisition du spectre de diffraction
- Première analyse qualitative et quantitative
- **TP6 : Étude comparative de deux matériaux cristallins**
- Comparaison de leurs diagrammes de diffraction
- Analyse de leur structure et propriétés attendues
- Rapport écrit avec interprétation structurale

Ressources communes à tous les TP

Logiciels : VESTA, FullProf Suite (EdPCR, WinPlotr), PowderCell (optionnel)

Fichiers CIF : disponibles sur <https://www.crystallography.net/cod/>

Données expérimentales ou simulées : fournies par l'enseignant

Semestre : 3

UE : Découverte

Matière : Chimie de Coordination

Objectifs de l'enseignement :

- Le cours de chimie inorganique dispense les connaissances de base en structure de la matière (atomes, molécules, associations intermoléculaires, solides). Ce cours apporte une formation de base en chimie inorganique générale (chimie de coordination et chimie du solide) et des connaissances indispensables en chimie descriptive des éléments.

Connaissances préalables recommandées

Contenu de la matière :

1. Introduction et rappels

- Importance économique de la chimie inorganique
- Rappels sur les liaisons
- Solides moléculaires et non-moléculaires
- Classification des réactions
- Niveaux d'énergie (termes) des atomes et des ions libres.

2. Introduction aux complexes de coordination

- Composés de coordination ou complexes, coordinats : définitions, classification de Green
- Classification et nomenclature des complexes
- Isomérisation
- Complexes en solution aqueuse
- Méthodes expérimentales d'étude

3. Modèles du Champ Cristallin et du Champ de Ligands

- Symétrie moléculaire et théorie des groupes
- L'approximation monoélectronique : Aspects qualitatifs – Aspects quantitatifs. Facteurs influençant la force du champ cristallin - Effet Jahn-Teller
- Aspects thermodynamiques. Energie de Stabilisation due au Champ Cristallin, Energie de réseau, Enthalpie de coordination, cas des spinelles.
- Ion central « à plusieurs électrons » : Approximations du champ faible et du champ fort. Diagrammes de corrélation.
- Spectroscopie électronique (UV-visible, proche IR) : Classification des transitions règles de sélection. Intensités d'absorption - diagrammes d'Orgel et de Tanabé-Sugano

4. Propriétés magnétiques

- Introduction - Approche macroscopique
- II. Approche microscopique : niveaux atomiques et moléculaire

5. Modèle des Orbitales Moléculaires

- Méthode OM-CLOA
- Les complexes octaédriques
- Autres symétries

6. Réactivité des complexes en solution aqueuse

- L'eau, structure et propriétés
- Généralités sur les réactions des complexes en solution : stabilité/instabilité, inertie/labilité
- Complexes et oxydoréduction
- Complexes et acido-basicité

Références bibliographiques :

- H.B. GRAY: les électrons et la liaison chimique (Dunod)

- Y. JEAN: Les orbitales Moléculaires dans les complexes (éditions de l'Ecole Polytechnique)
- P.H. WALTON: Chimie et Théorie des groupes (De Boek éditeur)

Les ouvrages suivants couvrent un large domaine : seuls certains chapitres couvrent le programme de cette UE.

- SHRIVER et ATKINS ; Chimie inorganique (De Boek éditeur, traduction de la 3^{eme} édition américaine, 2001)
- HUHUEY, KEITER ET KEITER, Chimie inorganique (De Boek éditeur),
- G. WULFSBERG, Chimie, théories et applications (Dunod, 2002)
- F. MATHEY et P. SEVIN, Introduction à la Chimie Moléculaire des Eléments de Transition (Ellipses, 1991)

Semestre : 3

UE : Transversale

Matière : [Entrepreneuriat, Innovation et Startup](#)

Objectifs de l'enseignement

L'objectif de ce module est de former les étudiants aux fondamentaux de la gestion de projet et de les accompagner dans la création d'entreprises innovantes. À travers un format atelier en groupe, l'étudiant sera capable de :

- Maîtriser les méthodes et outils de gestion de projet (Gantt, Scrum, Business Model Canvas)
- Concevoir un plan d'affaires structuré et identifier les sources de financement (capital-risque, aides publiques)
- Développer un projet pratique (prototype ou startup) en équipe, avec une présentation orale et un pitch convaincant
- Adopter une démarche entrepreneuriale intégrant les enjeux de la gestion de projet et de l'innovation

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir des bases générales sur la gestion de projet, ainsi qu'une culture scientifique et technique suffisante pour comprendre les liens entre innovation technologique et entrepreneuriat.

Contenu de la matière :

1. Fondements de l'entrepreneuriat (4 semaines)

- Définition de l'entrepreneuriat – création de valeur par l'innovation et la prise de risque
- Piliers de l'entrepreneuriat : opportunité, innovation, gestion du risque, création de valeur
- L'écosystème entrepreneurial : chercheurs-entrepreneurs, investisseurs, incubateurs, clusters
- Processus de création d'entreprise : idéation → validation → business plan → lancement → croissance
- Enjeux scientifiques et techniques : brevets, normes, financement R&D, travail en équipes pluridisciplinaires
- Cas pratiques : simulation de dépôt de brevet, recherche de financement

2. L'esprit entrepreneurial dans les sciences et technologies (3 semaines)

- 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

3. De la recherche scientifique à l'opportunité entrepreneuriale (4 semaines)

- Transformer une découverte scientifique ou technologique en projet entrepreneurial
- Approche "problème-solution" : identification de besoins réels
- Initiation à l'étude de marché appliquée aux projets scientifiques
- Validation rapide d'une idée : prototype minimum viable (MVP), enquêtes, tests utilisateurs

4. Construire et modéliser son projet innovant (3 semaines)

- Introduction au Business Model Canvas (BMC) pour projets technologiques

- Définir une proposition de valeur claire et différenciante
- Identifier ressources, partenaires stratégiques, canaux de distribution

5. Lancer son projet scientifique ou technologique (4 semaines)

- 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

6. Réussir et se développer comme entrepreneur scientifique (4 semaines)

- 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 propriété intellectuelle : brevets, licences, valorisation de l'innovation
- Entrepreneuriat à impact : répondre aux défis environnementaux, sociaux et économiques
- Continuer à progresser : réseaux d'innovation, incubateurs, mentors, formations continues

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

- Verstraete, Thierry, Fayolle, Alain : *Entrepreneuriat – Fondements et dynamiques – De Boeck Supérieur, 2005*
- Julien, Pierre-André : *Entrepreneuriat – Devenir entrepreneur : théories et pratiques – Économica, 2007*
- Schieb-Bienfait, Nathalie, Lemoine, Valérie : *Entrepreneuriat – Théories et réalités entrepreneuriales– EMS, 2013*
- Fayolle, Alain : *Entrepreneuriat – Apprendre à entreprendre – Dunod, 2014*
- PMI (Project Management Institute): *A Guide to the Project Management Body of Knowledge (PMBOK® Guide) – 7th édition, 2021*
- Olivier Ezratty : *Guide des startups– édition annuelle gratuite*
- Steve Blank : *The Startup Owner's Manual: The Step-by-Step Guide for Building a Great Company– K&S Ranch, 2012*