Université de Toulouse

Faculté sciences et ingénierie Université de Toulouse

PÉRIODE D'ACCRÉDITATION : 2022 / 2026

UNIVERSITE DE TOULOUSE

SYLLABUS MASTER

Mention Chimie

Master 1 EM Theoretical Chemistry and Computational Modelling

http://www.fsi.univ-tlse3.fr/
https://www.univ-tlse3.fr/master-mention-chimie

2026 / 2027

20 NOVEMBRE 2026

SOMMAIRE

SCHÉMA ARTICULATION LICENCE MASTER 3

PRÉSENTATION 4

PRÉSENTATION DE LA MENTION ET DU PARCOURS 4

Mention Chimie 4

Parcours 4

PRÉSENTATION DE L'ANNÉE DE Master 1 EM Theoretical Chemistry and Computational Modelling 4

Aménagements des études : 4

RUBRIQUE CONTACTS 5

CONTACTS PARCOURS 5

CONTACTS MENTION 5

CONTACTS DÉPARTEMENT : FSI.Chimie 5

Tableau Synthétique des UE de la formation 6

LISTE DES UE 11

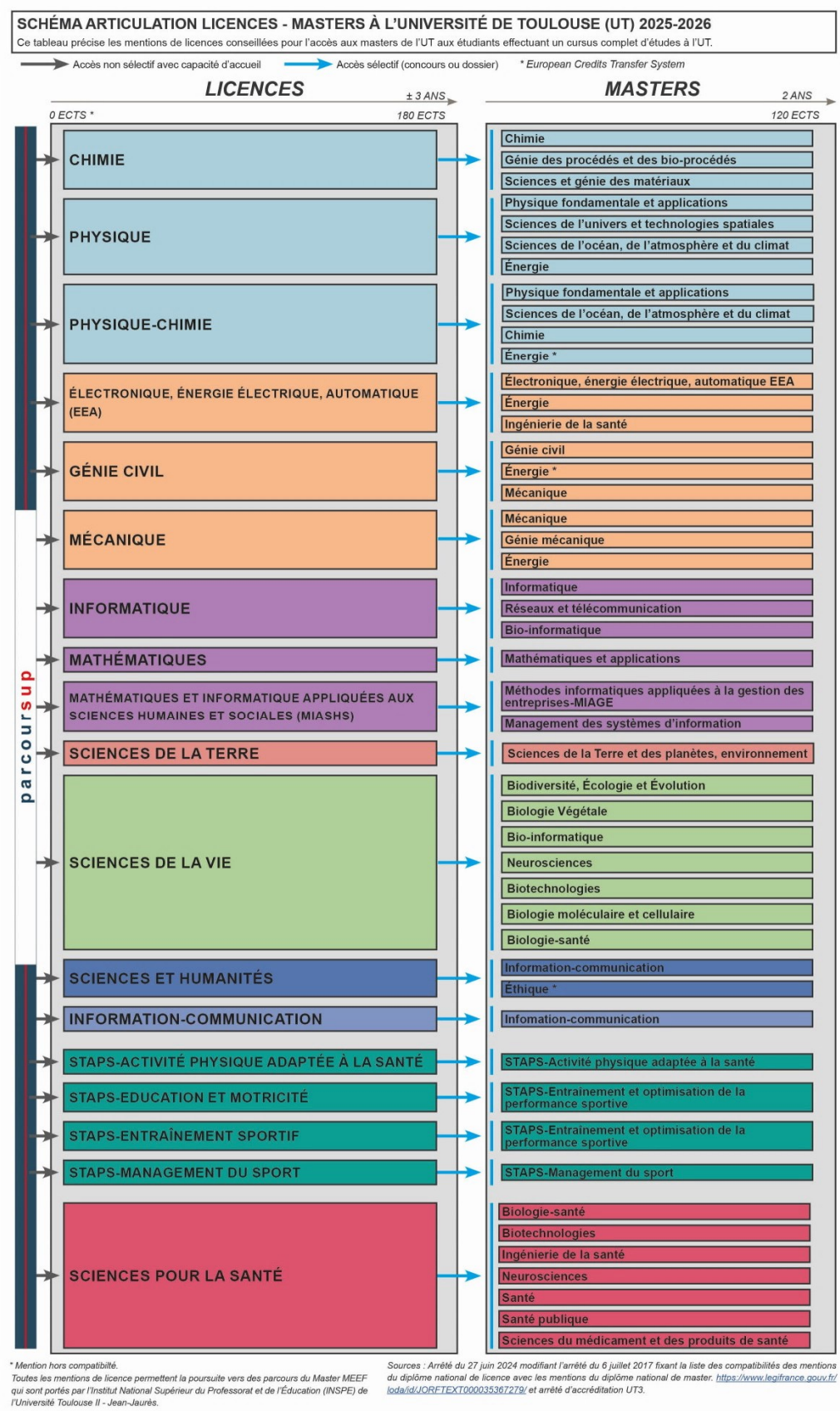
GLOSSAIRE 64

TERMES GÉNÉRAUX 64

TERMES ASSOCIÉS AUX DIPLOMES 64

TERMES ASSOCIÉS AUX ENSEIGNEMENTS 65

SCHÉMA ARTICULATION LICENCE MASTER



PRÉSENTATION DE LA MENTION ET DU PARCOURS

MENTION CHIMIE

L'objectif principal de la mention est de former des cadres supérieurs autonomes, occupant des postes à responsabilité.
Ce master propose 7 parcours :**Chimie santé (CS) , Chimie Verte (CV, Green chemistry) , Chimie analytique et instrumentation (CAI), Chimie computationnelle : théories, modélisation et applications (CCTMA)** , **Theoretical chemistry and computational modeling** (TCCM, Parcours Érasmus +), **International Chimie aux surfaces et interfaces** (ICSI)**, Préparation à l'agrégation** de Physique-chimie, option Chimie (PAGC).
Les quatre parcours CS, CV, CAI et CCTMA offrent la possibilité d'obtenir le label Cursus Master Ingénierie (CMI).
Le master chimie propose une orientation progressive dans le parcours choisi.
La première année comporte une part importante de tronc commun et des enseignements spécifiques à la spécialité choisie.
La deuxième année au contraire est fortement axée sur l'enseignement de spécialité et ne comporte qu'une partie d'enseignements de tronc commun.
Des stages sont inclus à la formation (minimum 8 semaines en M1, 5 à 6 mois en M2).

PARCOURS

A compléter

PRÉSENTATION DE L'ANNÉE DE MASTER 1 EM THEORETICAL CHEMISTRY AND COMPUTATIONAL MODELLING

A compléter

AMÉNAGEMENTS DES ÉTUDES :

A compléter

RUBRIQUE CONTACTS

CONTACTS PARCOURS

RESPONSABLE MASTER 1 EM THEORETICAL CHEMISTRY AND COMPUTATIONAL MODELLING

BEDOS Florence
Email : florence.bedos@univ-tlse3.fr Téléphone : 68.00

DINOI Chiara
Email : cdinoi@insa-toulouse.fr Téléphone : 05 67 04 88 56

EVANGELISTI Stefano
Email : stefano@irsamc.ups-tlse.fr

EVRARD David
Email : david.evrard@utoulouse.fr Téléphone : 05 61 55 60 73

SORTAIS Jean-Baptiste
Email : jean-baptiste.sortais@lcc-toulouse.fr

SUAUD Nicolas
Email : suaud@irsamc.ups-tlse.fr Téléphone : 05 61 55 65 48

CONTACTS MENTION

RESPONSABLE DE MENTION CHIMIE

SORTAIS Jean-Baptiste
Email : jean-baptiste.sortais@lcc-toulouse.fr

CONTACTS DÉPARTEMENT: FSI.CHIMIE

DIRECTEUR DU DÉPARTEMENT

CUNY Jérome
Email : jerome.cuny@utoulouse.fr Téléphone : 05 61 55 68 36

SECRETARIAT DU DÉPARTEMENT

CASTAING Juliette
Email : juliette.castaing@utoulouse.fr

TABLEAU SYNTHÉTIQUE DES UE DE LA FORMATION

Itinéraire TOULOUSE - S7 (30 ECTS)

page	Code	Intitulé UE	semestre*	ECTS	Obligatoire Facultatif	Cours	e-TD	TD	TP	TP DE	Projet
Premier semestre											
	KCHM7BAU	CHARACTERIZATION	I	6	O						
23		KCHX7AA1 Méthodes Spectroscopiques (DFASP2 INDUSTRIE)				20		24			
24		KCHX7AA2 Diffraction RX				8		8	4		
25	KCHM7BBU	DATA SCIENCES	I	3	O	13		10	4		
27	KCHM7BJU	QUANTUM CHEMISTRY METHODS AND APPLICATIONS 1	I	3	O			30			
31	KCHM7BNU	QUANTUM CHEMISTRY METHODS AND APPLICATIONS 2	I	3	O		30				
30	KCHM7BMU	QUANTUM MECHANICS IN PHYSICS AND CHEMISTRY	I	6	O		60				
26	KCHM7BEU	THEORETICAL CHEMISTRY PROGRAMMING PROJECT 1	I	3	O						50
Choisir 2 UE parmi les 8 UE suivantes :											
28	KCHM7BKU	CHEMICAL STATISTICAL MECHANICS 1	I	3	O			30			
18	KCHM7AFU	OUTILS ET STRATÉGIE DE SYNTHÈSE	I	3	O	20		20			
19	KCHM7AGU	SOLVANTS ET METHODES D'ACTIVATIONS ALTERNATIFS	I	3	O	10		20			
15	KCHM7ACU	CHIMIE ANALYTIQUE POUR L'ANALYSE CHIMIQUE	I	3	O	12		18			
20	KCHM7AHU	BASES DE PHARMACOLOGIE	I	3	O	15		15			
21	KCHM7AIU	CHIMIE BIOORGANIQUE	I	3	O	10		20			
16	KCHM7ADU	MÉTHODES DE SÉPARATIONS ET COUPLAGES	I	3	O	20		10			
29	KCHM7BLU	CHEMICAL STATISTICAL MECHANICS 2	I	3	O			0,01			

* **AN** :enseignenents annuels, **I** : premier semestre, **II** : second semestre

Itinéraire ESPAGNE - S8 (30 ECTS)

page	Code	Intitulé UE	semestre*	ECTS	Obligatoire Facultatif	Cours	e-TD	TD	TP	TP DE	Projet
Second semestre											
48	KCHM8EBU	ELECTRONIC STRUCTURE OF MATERIALS	II	3	O	30					
49	KCHM8ECU	THEORETICAL CHEMISTRY PROGRAMMING PROJECT 2	II	3	O						50
Choisir 4 UE parmi les 5 UE suivantes :											
47	KCHM8EAU	TRANSVERSAL SCIENTIFIC COMPETENCES	II	6	O	1					
50	KCHM8EDU	EXCITED STATES	II	6	O	1					
51	KCHM8EEU	THEORETICAL METHODS ON SOLIDS AND SURFACES	II	6	O	1					
52	KCHM8EFU	ULTRAFAST PHENOMENA IN CHEMISTRY : LASER-MOLECULES INTERACT.	II	6	O	1					
53	KCHM8EGU	DYNAMICS OF THE CHEMICAL REACTIONS	II	6	O	1					

* **AN** :enseignenents annuels, **I** : premier semestre, **II** : second semestre

Itinéraire LEUVEN - S8 (30 ECTS)

page	Code	Intitulé UE	semestre*	ECTS	Obligatoire Facultatif	Cours	e-TD	TD	TP	TP DE	Projet
Second semestre											
54	KCHM8LAU	RESEARCH INTERSHIP	II	12	F						50
55	KCHM8LBU	ELECTRONIC STRUCTURE OF MATERIALS	II	3	O	30					
56	KCHM8LCU	THEORETICAL CHEMISTRY PROGRAMMING PROJECT 2	II	3	O						50
Choisir 15 ECTS parmi les 6 UE suivantes :											
57	KCHM8LDU	COMPUTATIONAL METHODS IN SOLID STATE PHYSICS	II	3	O	1					

* **AN** :enseignenents annuels, **I** : premier semestre, **II** : second semestre

page	Code	Intitulé UE	semestre*	ECTS	Obligatoire Facultatif	Cours	e-TD	TD	TP	TP DE	Projet
58	KCHM8LEU	PHOTOPHYSICS AND PHOTOCHEMISTRY OF MOLECULAR MATERIALS	II	3	O	1					
59	KCHM8LFU	CHEMISTRY AT NANOMETER SCALE	II	6	O	1					
60	KCHM8LGU	BIOMOLECULAR INTERACTIONS	II	6	O	1					
61	KCHM8LHU	CHEMICAL APPLICATIONS OF GROUP THEORY	II	3	O	1					
62	KCHM8LIU	CHEMICAL APPLICATIONS OF GROUP THEORY	II	6	O	1					
63	KCHM8LJU	RESEARCH INTERSHIP	II	9	O						50

* **AN** :enseignenents annuels, **I** : premier semestre, **II** : second semestre

Itinéraire TOULOUSE - S8 (30 ECTS)

page	Code	Intitulé UE	semestre*	ECTS	Obligatoire Facultatif	Cours	e-TD	TD	TP	TP DE	Projet
Second semestre											
45	KCHM8BLU	THEORETICAL CHEMISTRY PROGRAMMING PROJECT 2	II	3	O						50
46	KCHM8BMU	THEORETICAL SPECTROSCOPY	II	3	O		30				
	KCHM8BBU	INTEGRATED PROJECT	II	6	O						
38	KCHX8AB2	Bibliographie									50
39	KCHX8AB3	Modélisation				8			22		
40	KCHX8AB4	Projet expérimental								30	
Choisir 2 UE parmi les 6 UE suivantes :											
41	KCHM8BGU	TRANSITION METAL FOR GREEN CHEMISTRY	II	3	O	10		20			
42	KCHM8BHU	POLYMERS AND SUSTAINABLE DEVELOPMENT	II	3	O	15		15			
43	KCHM8BIU	MODELLING OF MACROMOLECULES	II	3	O	20		5	5		
34	KCHM8AJU	SYNTHÈSE ORGANIQUE	II	3	O	15		15			

* **AN** :enseignenents annuels, **I** : premier semestre, **II** : second semestre

page	Code	Intitulé UE	semestre*	ECTS	Obligatoire Facultatif	Cours	e-TD	TD	TP	TP DE	Projet
32	KCHM8AEU	ELECTROCHIMIE	II	3	O	12		18			
33	KCHM8AFU	CHIMIE ANALYTIQUE ET DÉFIS SOCIÉTAUX	II	3	O	10		20			
44	KCHM8BKU	ELECTRONIC STRUCTURE OF MATERIALS	II	3	O			30			
Choisir 1 UE parmi les 3 UE suivantes :											
35	KCHM8AVU	FOREIGN LANGUAGE (FSI.LVG-Langues)	II	3	O			24			
37	KCHM8AZU	FRANCAIS LANGUE ETRANGERE (FSI.LVG-Langues)	II	3	O			24			
36	KCHM8AYU	FRANCAIS GRANDS DEBUTANTS (FLE GD)	II	3	O			24			

* **AN** :enseignenents annuels, **I** : premier semestre, **II** : second semestre

LISTE DES UE

UE	PRÉPARATION À L'INSERTION PROFESSIONNELLE	6 ECTS	
Sous UE	Stage		
KCHX8AD1	Stage : 2 mois minimum	Enseignement en français	Travail personnel 138 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

CIUCULESCU-PRADINES Diana
Email : eliza.ciuculescu-pradines@utoulouse.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

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

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Le stage permettra à l'étudiant :

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

PRÉ-REQUIS

Acquis théoriques et expérimentaux du niveau M1

COMPÉTENCES VISÉES

Compétences visées :

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

MOTS-CLÉS

Stage Universitaire ou Entreprise- France ou Etranger

UE	PRÉPARATION À L'INSERTION PROFESSIONNELLE	6 ECTS	
Sous UE	Professionnalisation		
KCHX8AD2	Cours : 6h , TD : 6h	Enseignement en français	Travail personnel 138 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

CIUCULESCU-PRADINES Diana
Email : eliza.ciuculescu-pradines@utoulouse.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

L'objectif est de préparer l'étudiant à son insertion professionnelle : définir le projet professionnel, identifier les expériences et les compétences acquises, mettre en évidence les compétences et expériences à développer.

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Quelques principaux outils d'aide à l'insertion professionnelle seront développés : des règles de base de rédaction d'un curriculum vitae et d'une lettre de motivation. En plus des conférences ou ateliers assurés par des professionnels du secteur permettront un échange direct entre les étudiants et les professionnels, et apporteront aux étudiants une meilleure connaissance de l'entreprise.

PRÉ-REQUIS

Avoir réfléchi à son projet professionnel

COMPÉTENCES VISÉES

Compétences :

- Savoir construire son CV
- Savoir écrire sa lettre de motivation

MOTS-CLÉS

lettre de motivation, curriculum vitae

UE	PRÉPARATION À L'INSERTION PROFESSIONNELLE	6 ECTS	
Sous UE	Professionnalisation		
KCHX8AD3	Projet : 50h	Enseignement en français	Travail personnel 138 h

[Retour liste des UE]

UE	CHIMIE ANALYTIQUE POUR L'ANALYSE CHIMIQUE	3 ECTS	1er semestre
KCHM7ACU	Cours : 12h , TD : 18h	Enseignement en français	Travail personnel 45 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

GROS Pierre
Email : pierre.gros@univ-tlse3.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Ce module a pour objectif de présenter les outils physico-chimiques nécessaires à la mise en œuvre de réactions chimiques de manière contrôlée et efficace, de façon à définir les conditions opératoires optimales pour la réalisation d'analyses qualitatives et quantitatives. Les exemples d'application concernent les problèmes sociétaux contemporains : environnement, agroalimentaire, santé, contrôle des procédés industriels.

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

I/ Chimie analytique : concepts, méthodes et applications
II/ Rappels de thermodynamique et de cinétique chimique pour l'analyse
III/ Mise en œuvre optimale et sélective de réactions chimiques en phase homogène pour la préparation d'échantillons
IV/ Méthodes de séparation basées sur les équilibres hétérogènes

PRÉ-REQUIS

Réactions acido-basiques, précipitation, complexation, redox.
Bilan de matière. Constante d'équilibre. Thermodynamique et cinétique chimiques. Loi de vitesse

SPÉCIFICITÉS

Enseignement en présentiel et en langue française

COMPÉTENCES VISÉES

Compétences visées :

- Définir et évaluer les différentes étapes d'un procédé analytique pour l'objectif d'analyse visé
- Choisir et mettre en œuvre les conditions expérimentales de préparation d'échantillon et de protocole de dosage, en s'appuyant sur les équilibres chimiques en solution et la cinétique homogène et hétérogène

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

D. Skoog, D. West, F. Holler. *Chimie analytique* . De Boeck Université.
G. Charlot. *Chimie analytique quantitative* . Masson.
J. Sarrazin, M. Verdaguer. *L'oxydoréduction, concepts et expériences.* Ellipses.

MOTS-CLÉS

Chimie Analytique, Procédé analytique, Thermodynamique et cinétique, Couplage de réactions, milieux homogène et hétérogène, Préparation d'échantillon, Dosages

UE	MÉTHODES DE SÉPARATIONS ET COUPLAGES	3 ECTS	1er semestre
KCHM7ADU	Cours : 20h , TD : 10h	Enseignement en français	Travail personnel 45 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

AZEMA-DESPEYROUX Joëlle
Email : joelle.azema-despeyroux@univ-tlse3.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Acquérir de solides bases dans la connaissance et la compréhension du phénomène chromatographique. Connaître différentes techniques séparatives afin d'être en mesure de déterminer le bon système chromatographique adapté à la nature d'un mélange à séparer que ce soit pour une séparation analytique (pharmacologie, toxicologie, cosmétologie...) ou préparative (purification de molécules synthétiques). Acquérir les connaissances nécessaires à l'identification des substances séparées lors d'analyses chromatographiques couplées à la chromatographie à la spectrométrie de masse, l'un des couplages les plus répandus actuellement.

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

1. Propriétés physiques et interactions moléculaires des solvants - phénomènes de solvatation, ionisation et dissociation (solvatation spécifique des solvants)
2. Notions fondamentales de la chromatographie :
   - 2.1 paramètres de séparation et de rétention
   - 2.2 phénomène de dispersion dans la colonne chromatographique (expression globale de Van Deemter, diffusion, anisotropie et résistance au transfert de masse)
3. Chromatographie phase gazeuse
4. HPLC et UPLC : Chromatographies d'adsorption, de partage, HILIC, de paires d'ions, d'échange d'ions, d'exclusion, chirale et supercritique
5. Electrophorèse capillaire
6. Couplages de la chromatographie (phase gazeuse et liquide) à la spectrométrie de masse ; interfaces de couplage, contraintes techniques, apports, exemples d'applications

PRÉ-REQUIS

Notions de polarité, polarisabilité, interactions de faible énergie, pKA. Bases de chromatographie et de spectrométrie de masse (niveau L3).

COMPÉTENCES VISÉES

Compétences disciplinaires :
Identifier la méthode chromatographique la plus adaptée à la séparation d'un mélange de composés selon leur nature chimique (Niveau A)
Extraire les paramètres de rétention et de séparation d'un chromatogramme (Niveau A)
Identifier des composés à partir d'un chromatogramme "de masse" et des spectres y affairant (Niveau A)
Proposer une méthode de dosage (Niveau A)
Compétences spécifiques :
Concevoir, élaborer et mettre en œuvre une séparation chromatographique couplée à la spectrométrie de masse (*Niveau A*)
Identifier les conditions optimales de séparation des composés par le choix adéquat du système chromatographique (chimie de la phase stationnaire et choix des solvants éluants) afin d'améliorer la résolution et l'efficacité d'une séparation (*Niveau A*)

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Analyse chimique : Méthodes et techniques instrumentales modernes. F. Rouessac, A. Rouessac. 6° Ed. Dunod, 2004.
Liquid Chromatography : Fundamentals and Instrumentation. S. Fanali, P. Haddad, C. Poole. Elsevier Science, en ligne BU UPS, 2013

MOTS-CLÉS

Techniques séparatives, GC, HPLC, UPLC, paire d'ions, HILIC, ionique, chirale, SEC, SFC. Couplages GC/MS, HPLC/MS

UE	OUTILS ET STRATÉGIE DE SYNTHÈSE	3 ECTS	1er semestre
KCHM7AFU	Cours : 20h , TD : 20h	Enseignement en français	Travail personnel 35 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

MARTIN VACA Blanca Maria
Email : blanca-maria.martin-vaca@univ-tlse3.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

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

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

- [u]Réactions péricyclique[/u]s (théorie des orbitales frontières, règles de Woodward-Hoffmann, applications aux principales réactions péricycliques - cycloadditions, transpositions sigmatropiques ...)
- [u]Chimie radicalaire[/u] (applications aux réactions de cyclisation, règles de Baldwin, alternatives à l'étain)
- [u]Réactions assistées pas les métaux[/u]

Métaux groupes 1,2,11,12 : Méthodes de préparation d'organométalliques et applications pour la formation chimio- et régio-sélective de C-C
Métaux de transition : Présentation des transformations catalytiques de formation C-C et C=C (couplage CC et métathèse d'oléfines)
- [u]Création C-C avec les énolates[/u] : outils de contrôle de la chimio-, régio- et stéréosélectivité (contrôle cinétique vs thermodynamique, modèles - Ireland, Zimmermann-Traxler ...)
[u]- Chimie sans groupement protecteur[/u]

PRÉ-REQUIS

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

SPÉCIFICITÉS

Enseignement imparti en Français mais les supports écrits (polycopiés cours) sont en anglais
Une partie de l'enseignement est faite sous la forme de cours inversé

COMPÉTENCES VISÉES

spécifiques à l'UE :
Savoir choisir l'outil pour réaliser une transformation chimique (*création C-C et C=C en particulier) selon les règles de la chimie verte, notamment avec économie d'atomes et d'étapes, en utilisant la catalyse et/ou de réactifs moins nocifs . Niveau A*

1. Concevoir et mettre en œuvre des synthèses dans un contexte de développement durable en utilisant les principes de la chimie verte (*Niveau A*)
2. Identifier et analyser les enjeux de développement durable liés à l'élaboration d'un produit chimique en utilisant les principes de la chimie verte (*Niveau A*)

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

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

MOTS-CLÉS

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

UE	SOLVANTS ET METHODES D'ACTIVATIONS ALTERNATIFS	3 ECTS	1er semestre
KCHM7AGU	Cours : 10h , TD : 20h	Enseignement en français	Travail personnel 45 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

DE VIGUERIE Nancy
Email : nancy.de-viguerie@univ-tlse3.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

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

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

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

2. Chimie sans solvant
- Synthèse de matériaux et composés organiques. Transformations de la biomasse

3. Synthèse de molécules d'intérêt par voie de procédures respectueuse de l'environnement
- Réactions en milieux alternatifs : eau, liquides ioniques, solvants supercritiques, solvants provenant de la biomasse, autres (*Deep Eutectic Solvents* , solvants fluorés)
- Méthodes alternatives : processus photochimiques, activation par micro-ondes, mécano- et sono-chimie, processus sous pression, processus en flux continu

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

PRÉ-REQUIS

Chimie Organique niveau Licence. Connaissances basiques de Chimie Organométallique.

COMPÉTENCES VISÉES

Compétences disciplinaires :
Identifier et analyser les enjeux de développement durable liés à l'élaboration d'un produit chimique en utilisant les principes de la Chimie Verte (*Niveau A*)
Concevoir et mettre en œuvre des synthèses dans un contexte de développement durable en utilisant les principes de la chimie verte (*Niveau A*)
Proposer et développer des méthodes de valorisation chimique de la biomasse comme alternatives aux ressources fossiles (*Niveau N*)
Compétences spécifiques :
Concevoir, élaborer et mettre en œuvre des synthèses de produits chimiques dans un contexte de développement durable (*Niveau A*)
Identifier les conditions optimales de solvant / méthode d'activation les plus adaptés à une transformation chimique (*Niveau A*)

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

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

MOTS-CLÉS

Solvants éco-compatibles, modes d'activation, processus photochimiques, biomasse, applications industrielles

UE	BASES DE PHARMACOLOGIE	3 ECTS	1er semestre
KCHM7AHU	Cours : 15h , TD : 15h	Enseignement en français	Travail personnel 45 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

GILARD POTEAU Veronique
Email : veronique.gilard-poteau@univ-tlse3.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Donner aux étudiants les concepts nécessaires pour comprendre les étapes importantes du développement d'un médicament et l'étude de son devenir dans l'organisme. Les connaissances et compétences acquises dans cette unité d'enseignement constitueront une plus-value pour l'étudiant dans l'optique d'intégrer le domaine du « drug discovery » ou des bioanalyses aussi bien dans le secteur privé que public.

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Partie 1 : Introduction à la pharmacodynamique
Interactions médicament/récepteur : aspects qualitatifs et quantitatifs
Principales cibles des médicaments
Partie 2 : Introduction à la pharmacocinétique : Devenir du médicament dans *l'organisme.*
Barrières rencontrées par un médicament dans l'organisme
Propriétés physicochimiques des médicaments et ADME (Absorption, Distribution, Métabolisme, Excrétion)
Transporteurs membranaires
La fixation sur les protéines plasmatiques
Métabolisme des médicaments et cytochromes P450
Bases de pharmacocinétique et paramètres

PRÉ-REQUIS

Connaissance des propriétés physico-chimiques, notions de chimie organique et générale (Licence), notions élémentaires de biologie et de physiologie.

COMPÉTENCES VISÉES

- Décrire l'ensemble des processus régissant les phénomènes mis en œuvre dans le devenir d'un médicament dans l'organisme (absorption, distribution, métabolisme, excrétion).
- Analyser les paramètres physicochimiques d'une molécule pour en déduire ses propriétés ADME
- Comprendre l'intérêt des études en pharmacocinétique dans le développement d'un médicament

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Drug-like Properties : Concepts, Structure Design and Methods : from ADME to Toxicity Optimization. E. Harvel Kerns, Li Di. Academic Press, 2008
Y. Landry et J-P. Gies - Pharmacologie : des cibles vers l'indication thérapeutique, Dunod, 2014

MOTS-CLÉS

Récepteurs, médicament, absorption, distribution, métabolisme, excrétion, biodisponibilité, pharmacocinétique.

UE	CHIMIE BIOORGANIQUE	3 ECTS	1er semestre
KCHM7AIU	Cours : 10h , TD : 20h	Enseignement en français	Travail personnel 45 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

ROUX Clément
Email : clement.roux1@univ-tlse3.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

La nature représente à la fois un champ d'investigation et une source d'inspiration unique en chimie bioorganique. L'objectif de l'UE Chimie Bioorganique est d'identifier les propriétés spécifiques des enzymatiques à l'origine de leurs performances catalytiques de façon à :
(i) s'en inspirer pour la conception d'organocatalyseurs respectueux de l'environnement,
(ii) faire découvrir la richesse des mécanismes chimiques développés par la nature ainsi que les diverses applications issues de ces connaissances, depuis la conception rationnelle d'inhibiteurs jusqu'à la chimie fine effectuée par des enzymes.
Par ailleurs, cette UE sera l'occasion de présenter les réactions de la chimie organique moderne qui sont inspirées de mécanismes enzymatiques.

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

- Mécanismes et stratégies catalytiques des enzymes
- Enzymologie et stratégies d'inhibition
- Bioconversion : Utilisation d'enzymes en chimie organique
- Chimie bioinspirée ou biomimétique

PRÉ-REQUIS

Chimie Organique et Structure des Biomolécules, niveau L3.

COMPÉTENCES VISÉES

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

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

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

MOTS-CLÉS

Biosynthèse et notions de métabolisme, Mécanismes enzymatiques, Modèles cinétiques d'inhibition, Chimie biomimétique, Organocatalyse

UE	TUTORAT UE DISTANCE	ECTS	1er semestre
KCHM7AOU	TD : 30h	Enseignement en français	Travail personnel 30 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

SUAUD Nicolas
Email : suaud@irsamc.ups-tlse.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Le but des heures de tutorat est d'aider les étudiants dans les matières enseignées à distance.

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Le contenu porte sur les aspects qui posent problèmes aux étudiants, suivant leur demande

PRÉ-REQUIS

Aucun

SPÉCIFICITÉS

L'enseignement se fait en français ou anglais, sur des créneaux choisis en commun par l'ensemble des étudiants et l'enseignant concerné, en fonction de l'avancement du travail des étudiants.

COMPÉTENCES VISÉES

Les mêmes que les enseignements concernés

UE	CHARACTERIZATION	6 ECTS	1er semestre
Sous UE	Méthodes Spectroscopiques (DFASP2 INDUSTRIE)		
KCHX7AA1	Cours : 20h , TD : 24h	Enseignement en français	Travail personnel 86 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

BALAYSSAC Stephane
Email : stephane.balayssac@univ-tlse3.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

L'enseignement dispensé dans cette unité a pour objectif de former les étudiant(e)s aux principales méthodes spectroscopiques. L'ensemble de ces techniques constitue un outil puissant de détermination structurale.

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Cette UE permettra à l'étudiant(e)
- D'approfondir la spectroscopie RMN : phénomène de relaxation (T1, T2), effet NOE, RMN dynamique, hétéronoyaux (13C, 19F, 31P, ...), application à des problèmes de stéréochimie, utilisation des principales méthodes de RMN bidimensionnelle homonucléaire (COSY, TOCSY, J-résolu, NOESY, ROESY, DOSY) et hétéronucléaire (HMQC, HSQC, HMBC).
- D'aborder, en spectrométrie de masse, les méthodes d'ionisation récentes (ESI, APCI, MALDI...), la haute résolution et les modes de fonctionnement (MS/MS ascendant, descendant,...), mettant ainsi en évidence l'apport de ces méthodes pour l'identification structurale.
- D'appréhender l'intérêt de la complémentarité des méthodes spectroscopiques les plus courantes (IR, RMN, Masse) via leur application à des problèmes de détermination structurale.

PRÉ-REQUIS

Analyser et interpréter des spectres RMN 1H et 13C de petites molécules.
Connaître les principaux mécanismes de fragmentations et de réarrangements en IE.

COMPÉTENCES VISÉES

- Analyser et interpréter des spectres de RMN mono- et bi-dimensionnelles de petites molécules.
- Déterminer la structure d'une molécule à l'aide d'un ensemble de méthodes spectroscopiques
- Interpréter un spectre de masse et en faire ressortir des informations structurales

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Identification spectrométrique de composés organiques 3e édition, 2016, R.M Silverstein, F.X. Webster, D.J. Kiemle, D.L. Bryce. Ed : De Boeck supérieur (ISBN : 978-2-8073-0293-8), Spectrométrie de masse, De Hoffmann, Stroobant. Ed : Dunod

MOTS-CLÉS

Détermination de structures, RMN, spectrométrie de Masse

UE	CHARACTERIZATION	6 ECTS	1er semestre
Sous UE	Diffraction RX		
KCHX7AA2	Cours : 8h , TD : 8h , TP : 4h	Enseignement en français	Travail personnel 86 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

GORNITZKA Heinz
Email : heinz.gornitzka@lcc-toulouse.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

L'enseignement dispensé dans cette unité a pour objectif de former les étudiant(e)s aux principales méthodes de diffraction des rayons X.

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Cette UE permettra à l'étudiant(e) d'acquérir les bases des méthodes de diffraction des rayons X sur monocristaux appliquées à la détermination de la structure des molécules organiques et métalorganiques. La symétrie cristalline, les groupes d'espace, le facteur de diffusion, le facteur de structure, la densité électronique dans le cristal, le problème de la phase, la fonction de Patterson en présence d'un atome lourd et les différentes étapes de la solution au model final seront traités.

PRÉ-REQUIS

-

SPÉCIFICITÉS

-

COMPÉTENCES VISÉES

- Retrouver les éléments de symétrie et la maille élémentaire dans un motif périodique 3D.
- Localiser un atome lourd à l'aide des pics de Patterson et l'information sur un groupe d'espace.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

-

MOTS-CLÉS

Diffraction X

UE	DATA SCIENCES	3 ECTS	1er semestre
KCHM7BBU	Cours : 13h , TD : 10h , TP : 4h	Enseignement en français	Travail personnel 48 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

MARTY Jean-Daniel
Email : jean-daniel.marty@univ-tlse3.fr

UE	THEORETICAL CHEMISTRY PROGRAMMING PROJECT 1	3 ECTS	1er semestre
KCHM7BEU	Projet : 50h	Enseignement en français	Travail personnel 75 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

LEININGER Thierry
Email : Thierry.Leininger@irsamc.ups-tlse.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

L'objectif de cette UE est de cultiver la double compétence informatique/chimie théorique des étudiants du parcours par le biais de la résolution de problèmes de chimie théorique par le biais de la mise au point d'un algorithme et sa transcription dans un programme informatique.

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

L'UE donnera lieu à la réalisation d'un programme informatique, utilisant un langage de programmation au choix de l'étudiant, visant à la résolution d'un problème de chimie théorique : modélisation moléculaire, méthode de Hückel, mécanique moléculaire, symétrie moléculaire,...Une introduction au langage de programmation Fortran 95 sera dispensée, notamment pour les étudiants ne maîtrisons aucun langage de programmation. Les notions de base de l'architecture et du système d'exploitation d'une machine Linux seront également abordées.

PRÉ-REQUIS

Culture générale en physico-chimie (symétrie moléculaire, thermodynamique et cinétique chimiques, spectroscopies, chimie théorique niveau L3, méthode de Hückel

COMPÉTENCES VISÉES

Définir un algorithme et écrire un code informatique permettant de résoudre un problème de chimie théorique

UE	QUANTUM CHEMISTRY METHODS AND APPLICATIONS 1	3 ECTS	1er semestre
KCHM7BJU	TD : 30h	Enseignement en français	Travail personnel 45 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

GUIHERY Nathalie
Email : nathalie.guihery@irsamc.ups-tlse.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Cet enseignement fournit les bases théoriques d'analyse de l'origine microscopique de propriétés physico-chimiques insolites. Il s'adresse aussi bien aux théoriciens qu'aux étudiants qui se destinent à la chimie expérimentale.

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

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

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

PRÉ-REQUIS

Théorie LCAO, Hückel

SPÉCIFICITÉS

La langue d'enseignement est principalement l'anglais, mais les enseignants peuvent, à la demande des étudiants, passer au français pour faire passer certaines notions complexes.

COMPÉTENCES VISÉES

— savoir discerner les mécanismes physico-chimiques à l'origine des propriétés électroniques remarquables
— savoir établir un hamiltonien modèle adapté à un système physico-chimique, le résoudre et interpréter les solutions

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Atkins et De Paula, Physical Chemistry, Oxford

MOTS-CLÉS

Magnétisme moléculaire - Transfert électronique - Hamiltonien modèle

UE	CHEMICAL STATISTICAL MECHANICS 1	3 ECTS	1er semestre
KCHM7BKU	TD : 30h	Enseignement en français	Travail personnel 45 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

BERGER Jan
Email : arjan.berger@irsamc.ups-tlse.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

La tâche de la thermodynamique statistique est d'offrir une description d'un système permettant de faire le lien entre les propriétés microscopiques des particules dans le système et son comportement macroscopique à l'équilibre. Il est basé sur l'idée que l'état macroscopique du système est réalisé comme la moyenne sur un grand nombre d'états microscopiques indépendants. Nous verrons ici le fondement de ces principes statistiques et leurs applications.

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

1) Micro-états et macro-états
2) Ensemble micro-canonique
3) Ensemble canonique
4) Ensemble grand-canonique

PRÉ-REQUIS

Base de la thermodynamique niveau licence de Chimie, licence de Physique Chimie et connaissances mathématiques de base.

SPÉCIFICITÉS

Langue : Français ou anglais

COMPÉTENCES VISÉES

Compétences disciplinaires principales :
- Mobiliser les concepts de la thermodynamique statistique pour gérer er résoudre des problèmes dans les différents domaines de la chimie, et de la chimie physique.
- Modéliser des phénomènes ou des systèmes chimiques, ou d'interpréter des résultats expérimentaux.
- Développer une argumentation avec esprit critique.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

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

MOTS-CLÉS

Ensemble micro-canonique, Ensemble canonique, Ensemble grand-canonique

UE	CHEMICAL STATISTICAL MECHANICS 2	3 ECTS	1er semestre
KCHM7BLU	TD : 0,01h	Enseignement en français	Travail personnel 75 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

SUAUD Nicolas
Email : suaud@irsamc.ups-tlse.fr

UE	QUANTUM MECHANICS IN PHYSICS AND CHEMISTRY	6 ECTS	1er semestre
KCHM7BMU	e-TD : 60h	Enseignement en français	Travail personnel 90 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

SUAUD Nicolas
Email : suaud@irsamc.ups-tlse.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

At the end of the course, the student should attain :

- a real understanding of the quantum nature of matter ; introduction to simple models in quantum mechanics.
- a real understanding of the theoretical formalism used to describe quantum phenomena, which is needed for the characterization and engineering of materials.
- in-depth knowledge of electronic states ; quantum numbers, electronic transitions and their relation to spectroscopy ; electronic states in electric and magnetic fields.
- the necessary background for further learning of computational modeling methods and advanced techniques applicable to the elucidation of electronic and geometrical structures, as well as the spectroscopic properties of materials.

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

- Introduction to basic concepts in quantum physics and its relation to chemistry, modern materials science and engineering of nanodevices.
- To achieve the goals of this course, a mathematically-rigorous approach is combined with the physical interpretation of the concepts, and the application of the most important QM models to electronic and magnetic spectroscopies and chemistry is illustrated.

- Quantum Mechanics : Mathematical Background (AL Dalverny)
- The Schrodinger Equation(JS Filhol)
- Exact solutions (JS Filhol)
- Angular Momentum (AL Dalverny)
- Techniques of Approximation (AL Dalverny)
- Atomic Structure (AL Dalverny)

PRÉ-REQUIS

Differential calculus. Matrix algebra. A knowledge of crystallography

SPÉCIFICITÉS

Courses are given online by teachers of the University of Montpellier

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

C. Leforestier, Introduction à la Chimie Quantique, 2005, Dunod.
J.D. Simon, D. McQuarrie, Chimie Physique - Approche Moléculaire, 2000, Dunod.

MOTS-CLÉS

Spectroscopie atomique - spectroscopie rovibrationnelle - spectroscopie RMN

UE	QUANTUM CHEMISTRY METHODS AND APPLICATIONS 2	3 ECTS	1er semestre
KCHM7BNU	e-TD : 30h	Enseignement en français	Travail personnel 75 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

SUAUD Nicolas
Email : suaud@irsamc.ups-tlse.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

A compléter

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Homogenisation des connaissances pour aborder la modélisation - termes spectro.
Hartree-Fock. Notion de bases d'OA / CLOA.

PRÉ-REQUIS

Licence de chimie, chimie-physique voire physique. Il faut avoir suivi des cours de chimie théorique (atomistique, liaison chimique).

SPÉCIFICITÉS

A compléter

COMPÉTENCES VISÉES

A compléter

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

A compléter

MOTS-CLÉS

A compléter

UE	ELECTROCHIMIE	3 ECTS	2nd semestre
KCHM8AEU	Cours : 12h , TD : 18h	Enseignement en français	Travail personnel 45 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

EVRARD David
Email : david.evrard@utoulouse.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Cette UE vise à donner aux étudiants les bases de la cinétique électrochimique et des principales méthodes électrochimiques employées pour l'analyse, à l'état stationnaire et transitoire. Les techniques électrochimiques majeures développées pour l'analyse chimique ainsi que des éléments d'instrumentation sont abordés de façon à ce que l'étudiant puisse traiter en TP les problèmes analytiques rencontrés dans les laboratoires d'analyse ou de recherche : analyse agroalimentaire, environnementale, biochimique, élucidation de mécanismes réactionnels impliquant des échanges d'électrons...

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

- Thermodynamique électrochimique (équation de Nernst, types d'électrodes, dosages potentiométriques à courant nul)
- Cinétique électrochimique (équation de Nernst-Planck, formalismes de Tafel et de Koutecky-Levich, dosages potentiométriques à courant non-nul et ampérométriques)
- Techniques électrochimiques à l'état stationnaire (voltammétrie sur électrode tournante, polarographie à courant direct échantillonné) ou transitoire (voltammétrie cyclique, voltammétrie en couche mince, chronoampérométrie)
- Techniques impulsionnelles : voltammétries à impulsions normale ou différentielle, voltammétrie à vagues carrées
- Techniques à redissolution anodique ou cathodique.

De nombreux exemples seront traités afin d'illustrer les informations auxquelles chaque technique permet d'avoir accès.

PRÉ-REQUIS

Equilibrage des réactions - calculs des degrés d'oxydation - chimie des solutions (pH-métrie, complexation, solubilité/précipitation)

COMPÉTENCES VISÉES

- Tracer/analyser des courbes i = f(E)
- Extraire des courbes i = f(E) des informations sur le transfert d'électrons et le transport de matière
- Choisir la méthode adaptée à un problème d'analyse posé

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

A.J. Bard, L.R. Faulkner, Electrochemical methods. Fundamentals and applications (2nd Edition), John Wiley & Sons, Inc, 2001.

MOTS-CLÉS

voltampérométrie en régime stationnaire - voltampérométrie en régime transitoire - couche mince - méthodes à impulsions de potentiel

UE	CHIMIE ANALYTIQUE ET DÉFIS SOCIÉTAUX	3 ECTS	2nd semestre
KCHM8AFU	Cours : 10h , TD : 20h	Enseignement en français	Travail personnel 45 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

FAJERWERG Katia
Email : katia.fajerwerg@lcc-toulouse.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

L'enseignement dispensé dans cette unité a pour objectif de fournir aux étudiants les moyens d'appréhender le rôle du chimiste analyste dans les défis actuels environnementaux et de santé publique. Par le biais d'un projet final, les étudiants utiliseront leurs connaissances scientifiques pour communiquer de façon claire et concise sur un sujet touchant à des problématiques sociétales actuelles, en y associant les enjeux économiques.
Compétences visées :

- Sélectionner la(les) bonne(s) méthode(s) analytique(s) pour répondre à une problématique d'analyse d'échantillons
- Intégrer des notions économiques et de santé publique dans une démarche scientifique
- Synthétiser les enjeux scientifiques d'une problématique sociétale
- Communiquer à l'attention d'un public large à l'aide de média vidéo et écrit.

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

- aborder, plus spécifiquement, les techniques analytiques mises en œuvre pour l'étude d'échantillons environnementaux ou biologiques.
- appréhender les enjeux sous-jacents à une problématique sociétale, et développer son esprit de synthèse et son esprit critique.
- réaliser, sous forme visuelle et écrite, une communication synthétique claire et concise à l'attention d'un public large.

PRÉ-REQUIS

Techniques d'analyse niveau L3.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

D. A. Skoog, F. J. Holler, T. A. Nieman, **Principes d'analyse instrumentale** , Editions de Boeck (référence BU Sciences : 543 SKO)

MOTS-CLÉS

Défis sociétaux, chimie analytique, environnement, santé publique, communication audiovisuelle.

UE	SYNTHÈSE ORGANIQUE	3 ECTS	2nd semestre
KCHM8AJU	Cours : 15h , TD : 15h	Enseignement en français	Travail personnel 45 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

DEHOUX-BAUDOIN Cécile
Email : cecile.dehoux@utoulouse.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Apprendre des transformations complémentaires à celles déjà vues en licence et les appliquer à la synthèse de principe actifs. L'accent est porté sur le contrôle de la stéréosélectivité, sur les principales réactions organométalliques utiles en synthèse et sur les stratégies de synthèse d'hétérocycles.

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

- Utilisation en synthèse des complexes organométalliques de métaux de transition
- Synthèse asymétrique de composés bioactifs (chiralité axiale, dédoublement cinétique et cinétique dynamique)
- Contrôle de la stéréosélectivité lors de l'addition sur les carbonyles, de l'aldolisation, de l'oxydation et de la réduction d'oléfines)
- Les hétérocycles dans la synthèse de médicaments

PRÉ-REQUIS

Chimie organique niveau L3

COMPÉTENCES VISÉES

- Concevoir et mettre en œuvre des synthèses de principes actifs
- Contrôler la stéréosélectivité lors d'une transformation chimique
- Proposer un complexe organométallique pour une transforamtion chimique
- Concevoir des composés hétérocycliques

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Chimie Organique avancée, F. A. Carey et R. J. Sundberg, Ed. De Boeck Supérieur. Principles of asymmetric synthesis, Gawley, Robert E. Aubé, Jeffrey, Ed Elsevier Science

MOTS-CLÉS

énolate, stéréosélectivité, dédoublement, complexes organométalliques, hétérocycles

UE	FOREIGN LANGUAGE (FSI.LVG-Langues)	3 ECTS	2nd semestre
KCHM8AVU	TD : 24h	Enseignement en français	Travail personnel 51 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

MILLS LAHCENE Lorna
Email : lornalahcene@gmail.com

MURAT Julie
Email : julie.murat@univ-tlse3.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Niveau C1/C2 du CECRL (Cadre Européen Commun de Référence pour les Langues) L'objectif de cette UE est de permettre aux étudiants de développer les compétences indispensables à la réussite dans leur future vie professionnelle en contextes culturels variés.Il s'agira d'aquérir l'autonomie linguistique nécessaire et de perfectionner les outils de langue spécialisée permettant l'intégration professionnelle et la communication d'une expertise scientifique dans le contexte international.

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Les étudiants développeront :- les compétences liées à la compréhension de publications scientifiques ou professionnelles rédigées en anglais ainsi que les compétences nécessaires à la compréhension de communications scientifiques orales.- les outils d'expression permettant de maîtriser une présentation orale et/ou écrite et d'aborder une discussion critique dans le domaine scientifique, (ex. rhétorique, éléments linguistiques, prononciation...) .- la maîtrise des éléments d'argumentation critique à l'oral et/ou à l'écrit d'une publication scientifique- une réflexion plus large sur leur place, leur intégration et leur rayonnement en tant que scientifiques dans la société, abordant des questions d'actualité, d'éthique, d'intégrité... .

PRÉ-REQUIS

Niveau B2 du CECRL.

COMPÉTENCES VISÉES

S'exprimer avec aisance à l'oral, devant un public, en usant de registres adaptés aux différents contextes et aux différents interlocuteurs.Se servir aisément d'une langue vivante autre que le français : compréhension et expression écrites et orales :
- Comprendre un article scientifique ou professionnel rédigé en anglais sur un sujet relatif à leur domaine.
- Produire un écrit scientifique ou technique dans un anglais adapté, de qualité et respectant les normes et usages de la communauté scientifique anglophone.
-Interagir à l'oral en anglais : réussir ses échanges formels et informels lors des colloques, réunions ou entretiens professionnels.

MOTS-CLÉS

Projet - Anglais scientifique - Rédaction - Publication - Communications - esprit critique scientifique - interculturel

UE	FRANCAIS GRANDS DEBUTANTS (FLE GD)	3 ECTS	2nd semestre
KCHM8AYU	TD : 24h	Enseignement en français	Travail personnel 75 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

DULAC Céline
Email : celine.dulac@univ-tlse3.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

acquérir les compétences de base afin de pouvoir s'insérer plus facilement dans la vie quotidienne à Toulouse

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

- compréhension et expression orales du français général de niveau A1
- acquisition de vocabulaire et de structures de niveau A1
- éléments de prononciation et de prosodie du français
- réflexion sur les différences interculturelles

PRÉ-REQUIS

No prior knowledge in French. / Aucune connaissance préalable du français.

SPÉCIFICITÉS

Ce cours est accessible uniquement aux étudiant-e-s des masters dispensés entièrement en anglais, à condition qu'ils-elles n'aient pas de connaissance préalable du français.

COMPÉTENCES VISÉES

- acquérir des compétences en expression et compréhension orales
- communiquer dans le cadre des tâches liées à la vie quotidienne
- exprimer son opinion sur des sujets simples
- acquérir certaines des connaissances lexicales et grammaticales du niveau A1

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Communiqués par l'enseignant-e- en début de semestre.

MOTS-CLÉS

Français Langue Etrangère, Insertion, Interculturalité

UE	FRANCAIS LANGUE ETRANGERE (FSI.LVG-Langues)	3 ECTS	2nd semestre
KCHM8AZU	TD : 24h	Enseignement en français	Travail personnel 51 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

DULAC Céline
Email : celine.dulac@univ-tlse3.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Développer ses compétences langagières et interculturelles en français durant un séjour d'études en France.

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

- compréhension et expression orales du français général de niveau A1/A2, B1 ou B2+ selon le cours suivi
- acquisition de vocabulaire et de structures de niveau A1/A2, B1 ou B2+ selon le cours suivi
- éléments de prononciation et de prosodie du français
- réflexion sur les différences interculturelles

PRÉ-REQUIS

Passation du test ELAO. L'étudiant-e suit le cours de son niveau (A1/A2, B1 ou B2).

SPÉCIFICITÉS

Ce cours est accessible uniquement aux étudiant-e-s étrangers-ères non francophones et en échange à l'UT3.

COMPÉTENCES VISÉES

Les compétences visées dépendent du niveau CECRL de l'étudiant-e ; chaque cours est adapté en fonction des descriptifs du CECRL.

MOTS-CLÉS

Français Langue Etrangère, Insertion, Interculturalité

UE	INTEGRATED PROJECT	6 ECTS	2nd semestre
Sous UE	Bibliographie		
KCHX8AB2	Projet : 50h	Enseignement en français	Travail personnel 90 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

CIUCULESCU-PRADINES Diana
Email : eliza.ciuculescu-pradines@utoulouse.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Le module **Bibliographie** est un*sous-UE* de *lØUE Projet intégré* . L'objectif est de comprendre les problématiques d'un sujet de recherche donné, le situer dans un contexte général, présenter le concept développé et les applications éventuelles à partir de la littérature scientifique.

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Analyse bibliographique à partir de publications scientifiques en anglais permettant d'acquérir les bases et le vocabulaire nécessaire pour comprendre le contenu scientifique et à en extraire les informations indispensables à la réalisation d'un travail expérimental ou de modélisation pour les étudiants CTM/TCCM qui se déroulera en fin de semestre. Ce module s'appuiera sur le module d'anglais qui apportera aux étudiants le support nécessaire pour être capable de lire, de résumer et de traduire une publication scientifique en anglais mais aussi de comprendre un document scientifique et de présenter oralement des résultats scientifiques.

PRÉ-REQUIS

Chimie structurale, spectroscopies, réactivité chimique, techniques de séparations, suivre un protocole expérimental et connaissance de l'anglais scientifique

SPÉCIFICITÉS

Travail en tétranôme s'effectuant sur la base d'entretiens avec un enseignant référent et en autonomie.

COMPÉTENCES VISÉES

Compétences visées :

- travailler en équipe
- comprendre des articles scientifiques
- préparer un programme d'expériences
- adapter un protocole extrait de la litérature
- choisir les méthodes analytiques adaptées
- présenter des résultats scientifiques de la synthèse bibliographique (oral en anglais)

MOTS-CLÉS

analyse bibliographique, anglais scientifique, synthèse bibliographique

UE	INTEGRATED PROJECT	6 ECTS	2nd semestre
Sous UE	Modélisation		
KCHX8AB3	Cours : 8h , TP : 22h	Enseignement en français	Travail personnel 90 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

CIUCULESCU-PRADINES Diana
Email : eliza.ciuculescu-pradines@utoulouse.fr

POTEAU Romuald
Email : romuald.poteau@univ-tlse3.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Les performances des ordinateurs modernes, les développements méthodologiques récents des méthodes de chimie théorique, ainsi que la démocratisation des logiciels basés sur ces méthodes, permettent au chimiste de traiter par la modélisation moléculaire des systèmes de grande dimension, aussi bien comme outil complémentaire aux méthodes de détermination structurale que comme outil de chimie prédictive. On délivrera en cours et en TP un bagage minimal afin : de connaître les limites et les possibilités des méthodes ; de savoir comment accéder à des grandeurs comparables à l'expérience (RMN, Infra-Rouge, RX, grandeurs thermodynamiques et cinétiques) ; d'estimer la précision et la fiabilité des résultats. On proposera également de réaliser un projet en relation les TP « synthèse et caractérisation ».

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

- modèles moléculaires 3D
- chimie structurale et optimisation de géométrie, surface d'énergie potentielle
- quelle méthode de modélisation pour quel usage ? DFT *vs* . WFT
- mise au point d'un calcul de modélisation par chimie quantique
- applications : isomères, infra-rouge, RMN, réactivité chimique

PRÉ-REQUIS

Bases de chimie théorique ("atomistique"), de spectroscopie, de chimie organique et inorganique, ainsi que de thermodynamique et cinétique chimiques

SPÉCIFICITÉS

- diaporama en anglais
- TP depuis une salle informatique sur des noeuds de calcul haute performance

COMPÉTENCES VISÉES

- exploiter et analyser les résultats issus de calculs basés sur les principales méthodes de la chimie théorique
- définir et mettre en œuvre une stratégie de modélisation numérique à partir d'un problème expérimental en chimie
- comprendre les enjeux et contraintes de travaux de modélisation
- savoir utiliser des outils de modélisation 3D (viewer 3D)

MOTS-CLÉS

Modélisation moléculaire ; DFT ; calcul intensif

UE	INTEGRATED PROJECT	6 ECTS	2nd semestre
Sous UE	Projet expérimental		
KCHX8AB4	TP DE : 30h	Enseignement en français	Travail personnel 90 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

CIUCULESCU-PRADINES Diana
Email : eliza.ciuculescu-pradines@utoulouse.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Le module **Projet expérimental** est un *sous-UE* de *lØUE Projet intégré* . L'objectif de cette partie « pratique » est de se rapprocher de la démarche suivie en laboratoire de recherche, et envisage la conception d'expériences et leur réalisation et la comparaison des résultats expérimentaux à ceux obtenus dans la partie modélisation.

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Les étudiants (même tétranôme que pour le module bibliographie) doivent réaliser les expériences choisies lors de l'étude bibliographique, caractériser les produits et porter un regard critique sur les résultats obtenus. Certains modes opératoires peuvent être à modifier, il faudra faire preuve d'esprit d'initiative et savoir travailler en groupe.

PRÉ-REQUIS

Chimie structurale, spectroscopies, réactivitØe chimique, techniques de séparations, suivre un protocole expérimental et connaissance de l'anglais scientifique

SPÉCIFICITÉS

Cette partie se déroulera sur 3 journées continues consécutives dans les salles de travaux pratiques.

COMPÉTENCES VISÉES

Compétences visées :

- travailler en équipe
- préparer un programme d'expériences
- adapter et mettre en oeuvre un protocole extrait de la litérature
- choisir et mettre en oeuvre les méthodes analytiques adaptées
- confronter les résultats expérimentaux avec ceux issus de calculs de modélisation
- présenter des résultats scientifiques (rapport et oral en français)

MOTS-CLÉS

Confrontation théorie-expérience, anglais scientifique, travail en équipe, projet pluridisciplinaire

UE	TRANSITION METAL FOR GREEN CHEMISTRY	3 ECTS	2nd semestre
KCHM8BGU	Cours : 10h , TD : 20h	Enseignement en français	Travail personnel 45 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

SUTRA Pierre
Email : pierre.sutra@lcc-toulouse.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

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

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Photochimie des complexes de métaux de transition
Diagramme de Perrin-Jablonski
Nature des états excités des complexes de métaux de transition et paramètres photophysiques
Réactivité chimique des états excités des complexes de métaux de transition (échanges de ligands, décomplexation, redox, réactivité des ligands...)
Luminescence
Conception et propriétés de complexes de métaux de transition pour des applications en chimie verte
Introduction à la catalyse avec/sans étape redox
Réduction du CO2
Imagerie médicale
Magnétisme
Réduction du proton
Photocatalyse redox
Complexes de métaux de transition pour l'optoélectronique, application aux OLEDs et aux capteurs
Complexes de métaux de transition pour l'énergie, application au photovoltaïque et à la photodécomposition de l'eau

PRÉ-REQUIS

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

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Inorganic chemistry, J.E. Huheey, E.A. Keiter, R.L. Keiter, 4th ed, New York , - BU MG 546 HUH
Les orbitales moléculaires dans les complexes, Y. Jean, Ed. Ecole polytechnique - BU 544.1(079) JEA

MOTS-CLÉS

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

UE	POLYMERS AND SUSTAINABLE DEVELOPMENT	3 ECTS	2nd semestre
KCHM8BHU	Cours : 15h , TD : 15h	Enseignement en français	Travail personnel 45 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

DESTARAC Mathias
Email : mathias.destarac@univ-tlse3.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Connaître la chimie des polymères en l'intégrant dans un contexte global de développement durable. Aborder les matières premières, les techniques de synthèse et d'analyse des polymères avec une démarche de chimie verte. Comprendre les relations structure-propriétés des polymères. Avoir des connaissances de base sur la législation des polymères et leur cycle de vie.

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

1. Introduction aux polymères
- Histoire des polymères
- Définitions
- Relation structure / propriétés
- Méthodes de synthèse
- Méthodes d'analyse spécifiques
- Polymères et législation Reach
2. Chimie des polymères éco-responsable
- Solvants et modes d'activation
- Matières premières biosourcées
- Polymères naturels et artificiels
- Cycle de vie (biodégradabilité, recyclabilité)

PRÉ-REQUIS

Chimie Organique niveau Licence

COMPÉTENCES VISÉES

1. Identifier et analyser les enjeux de développement durable liés à l'élaboration d'un polymère en utilisant les principes de la Chimie Verte (*Niveau M*)
2. Concevoir et mettre en œuvre des synthèses dans un contexte de développement durable en utilisant les principes de la chimie verte (*Niveau M*)
3. Proposer et développer des méthodes de valorisation chimique de la biomasse comme alternatives aux ressources fossiles (*Niveau N*)

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

1. Sustainable polymers from biomass, by C. Tang and C. Y. Ryu, Eds. Wiley-VCH, 2017.
2. Bio-Based Polymers for Engineered Green Materials | MDPI Books. G. Tondi and T. Schnabel, Eds. 2020. Open access pdf book.

MOTS-CLÉS

Polymères, biomasse, ressources renouvelables, polymères biosourcés

UE	MODELLING OF MACROMOLECULES	3 ECTS	2nd semestre
KCHM8BIU	Cours : 20h , TD : 5h , TP : 5h	Enseignement en français	Travail personnel 45 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

JOLIBOIS Franck
Email : franck.jolibois@utoulouse.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

Ce module d'enseignement a pour objectif de fournir et d'appréhender certaines bases théoriques associées à certaines méthodes de modélisation que l'on trouve dans différents domaines en lien avec les sciences du vivant et de la santé.
A la fin de cet enseignement, les étudiants seront capables :
- de comprendre et appréhender les bases de la modélisation des macromolécules appliquée à des systèmes de grande taille en lien avec les sciences du vivant
- d'avoir un regard critique sur les travaux réalisés et publiés dans le domaine
- de concevoir et effectuer des modélisations physico-chimiques simples

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Sur la base de projets guidés et encadrés par les enseignants, les thématiques suivantes seront abordées :
« *Pourquoi modéliser ?* » : Les principaux domaines d'application de la modélisation moléculaire, leur intérêt en biologie (interactions substrats-macromolécules, organisation, découverte de molécules bioactives par criblage virtuel, ...), et en caractérisation structurale (propriétés spectroscopiques, électroniques, ...).
« *Quoi modéliser ?* » : La notion de modèles physico-chimiques (Qu'est-ce qu'une macromolécule ? Est-il nécessaire de la traiter dans sa globalité ? Quels modèles utiliser pouvant aller du plus simpliste au plus compliqué ?). Un lien sera fait avec la notion de calcul d'énergie (des méthodes de chimie quantique aux approches « gros grains » en passant par une hiérarchie de méthodes).
« *Comment modéliser ?* » : Les approches employées pour déterminer différentes propriétés structurales, spectroscopique ou de réactivité chimique (Optimisation locale et globale ; Exploration de surfaces d'énergie potentielle, Docking moléculaire, Analyse Thermo-statistique, Propriétés spectroscopiques et électroniques).

PRÉ-REQUIS

Connaissances en chimie générale et chimie-physique de niveau Licence

COMPÉTENCES VISÉES

- Mobiliser des savoirs hautement spécialisés, dont certains sont à l'avant-garde du savoir dans un domaine de travail ou d'études, comme base d'une pensée originale (*Maîtrise*)
- Développer une conscience critique des savoirs dans un domaine et/ou à l'interface de plusieurs domaines (*Maîtrise*)
- Résoudre des problèmes pour développer de nouveaux savoirs et de nouvelles procédures et intégrer les savoirs de différents domaines. (*Maîtrise*)

MOTS-CLÉS

Modélisation moléculaire, Calcul d'énergie, Exploration de surface d'énergie potentielle, Docking moléculaire

UE	ELECTRONIC STRUCTURE OF MATERIALS	3 ECTS	2nd semestre
KCHM8BKU	TD : 30h	Enseignement en français	Travail personnel 75 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

SUAUD Nicolas
Email : suaud@irsamc.ups-tlse.fr

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

Gaz d'électrons
1.1.Théorie quantique du gaz d'électrons libres,
1.2.Conductibilité électrique et loi d'Ohm.
1.3.Applications physiques de la théorie du gaz d'électrons libres.
1.4.Réseau réciproque, Zone de Brillouin.
2.Des orbitales moléculaires aux bandes d'énergie.
2.1.Equation de Schrödinger dans un solide cristallin - méthode des « liaisons fortes »
2.2.Fonctions de Block, orbitales cristallines, Energie de Fermi
2.3.Diagramme de bandes, Distorsions de Peierls
2.4.Exemples d'applications : propriétés électronique, dopage

SPÉCIFICITÉS

Enseignement dispensés par des enseignants de l'université de Pau

UE	THEORETICAL CHEMISTRY PROGRAMMING PROJECT 2	3 ECTS	2nd semestre
KCHM8BLU	Projet : 50h	Enseignement en français	Travail personnel 75 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

LEININGER Thierry
Email : Thierry.Leininger@irsamc.ups-tlse.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

A compléter

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

A compléter

PRÉ-REQUIS

A compléter

SPÉCIFICITÉS

A compléter

COMPÉTENCES VISÉES

A compléter

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

A compléter

MOTS-CLÉS

A compléter

UE	THEORETICAL SPECTROSCOPY	3 ECTS	2nd semestre
KCHM8BMU	e-TD : 30h	Enseignement en français	Travail personnel 45 h

[Retour liste des UE]

ENSEIGNANT(E) RESPONSABLE

SUAUD Nicolas
Email : suaud@irsamc.ups-tlse.fr

OBJECTIFS D'APPRENTISSAGE

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

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

DESCRIPTION SYNTHÉTIQUE DES ENSEIGNEMENTS

1. Introduction aux spectroscopies - généralités
a) Interaction Matière-Rayonnement. b) Absorption/Emission(microscopique). c)L'Équilibre Thermique
2. Spectroscopie Atomique
a) Rappels de Mécanique Quantique. b) Le Moment Cinétique. c) Addition de 2 Moments Cinétiques. d) Le Couplage Spin-Orbite. e) Termes Spectroscopiques. f) Règles de Hund. g) Spectres Atomiques
3. Vibration-Rotation des Molécules
a) Molécule Diatomique. b) Vibration des Polyatomiques. c) Rotation des Polyatomiques
4. Spectroscopie Moléculaire Électronique
a) Orbitales Moléculaires-Configurations Électroniques. b) Termes Électroniques. c) Transitions Vibroniques. d) Éléments de Photochimie. e) Spectroscopie Photoélectronique
5. Spectroscopie RMN
a) Hamiltonien effectif de spins. b) Tenseur de blindage, contributions dia- et paramagnétiques. c) Couplage spin-spin. d) Règles de sélection

PRÉ-REQUIS

Principes de base de la mécanique quantique - Théorie des groupes

SPÉCIFICITÉS

Courses provided online by teachers of the University of Montpellier

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

C. Leforestier, Introduction à la Chimie Quantique, 2005, Dunod.
J.D. Simon, D. McQuarrie, Chimie Physique - Approche Moléculaire, 2000, Dunod.

MOTS-CLÉS

Spectroscopie atomique - spectroscopie rovibrationnelle - spectroscopie RMN

UE	TRANSVERSAL SCIENTIFIC COMPETENCES	6 ECTS	2nd semestre
KCHM8EAU	Cours : 1h	Enseignement en français	Travail personnel 150 h

[Retour liste des UE]

UE	ELECTRONIC STRUCTURE OF MATERIALS	3 ECTS	2nd semestre
KCHM8EBU	Cours : 30h	Enseignement en français	Travail personnel 75 h

[Retour liste des UE]

UE	THEORETICAL CHEMISTRY PROGRAMMING PROJECT 2	3 ECTS	2nd semestre
KCHM8ECU	Projet : 50h	Enseignement en français	Travail personnel 75 h

[Retour liste des UE]

UE	EXCITED STATES	6 ECTS	2nd semestre
KCHM8EDU	Cours : 1h	Enseignement en français	Travail personnel 150 h

[Retour liste des UE]

UE	THEORETICAL METHODS ON SOLIDS AND SURFACES	6 ECTS	2nd semestre
KCHM8EEU	Cours : 1h	Enseignement en français	Travail personnel 150 h

[Retour liste des UE]

UE	ULTRAFAST PHENOMENA IN CHEMISTRY : LASER-MOLECULES INTERACT.	6 ECTS	2nd semestre
KCHM8EFU	Cours : 1h	Enseignement en français	Travail personnel 150 h

[Retour liste des UE]

UE	DYNAMICS OF THE CHEMICAL REACTIONS	6 ECTS	2nd semestre
KCHM8EGU	Cours : 1h	Enseignement en français	Travail personnel 150 h

[Retour liste des UE]

UE	RESEARCH INTERSHIP	12 ECTS	2nd semestre
KCHM8LAU	Projet : 50h	Enseignement en français	Travail personnel 300 h

[Retour liste des UE]

UE	ELECTRONIC STRUCTURE OF MATERIALS	3 ECTS	2nd semestre
KCHM8LBU	Cours : 30h	Enseignement en français	Travail personnel 75 h

[Retour liste des UE]

UE	THEORETICAL CHEMISTRY PROGRAMMING PROJECT 2	3 ECTS	2nd semestre
KCHM8LCU	Projet : 50h	Enseignement en français	Travail personnel 75 h

[Retour liste des UE]

UE	COMPUTATIONAL METHODS IN SOLID STATE PHYSICS	3 ECTS	2nd semestre
KCHM8LDU	Cours : 1h	Enseignement en français	Travail personnel 75 h

[Retour liste des UE]

UE	PHOTOPHYSICS AND PHOTOCHEMISTRY OF MOLECULAR MATERIALS	3 ECTS	2nd semestre
KCHM8LEU	Cours : 1h	Enseignement en français	Travail personnel 75 h

[Retour liste des UE]

UE	CHEMISTRY AT NANOMETER SCALE	6 ECTS	2nd semestre
KCHM8LFU	Cours : 1h	Enseignement en français	Travail personnel 150 h

[Retour liste des UE]

UE	BIOMOLECULAR INTERACTIONS	6 ECTS	2nd semestre
KCHM8LGU	Cours : 1h	Enseignement en français	Travail personnel 150 h

[Retour liste des UE]

UE	CHEMICAL APPLICATIONS OF GROUP THEORY	3 ECTS	2nd semestre
KCHM8LHU	Cours : 1h	Enseignement en français	Travail personnel 75 h

[Retour liste des UE]

UE	CHEMICAL APPLICATIONS OF GROUP THEORY	6 ECTS	2nd semestre
KCHM8LIU	Cours : 1h	Enseignement en français	Travail personnel 150 h

[Retour liste des UE]

UE	RESEARCH INTERSHIP	9 ECTS	2nd semestre
KCHM8LJU	Projet : 50h	Enseignement en français	Travail personnel 225 h

[Retour liste des UE]

GLOSSAIRE

TERMES GÉNÉRAUX

SYLLABUS

Dans l'enseignement supérieur, un syllabus est la présentation générale d'un cours ou d'une formation. Il inclut : objectifs, programme de formation, description des UE, prérequis, modalités d'évaluation, informations pratiques, etc.

DÉPARTEMENT

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

UE : UNITÉ D'ENSEIGNEMENT

Un semestre est découpé en unités d'enseignement qui peuvent être obligatoires, à choix ou facultatives. Une UE représente un ensemble cohérent d'enseignements auquel sont associés des ECTS.

UE OBLIGATOIRE / UE FACULTATIVE

L'UE obligatoire fait référence à un enseignement qui doit être validé dans le cadre du contrat pédagogique. L'UE facultative vient en supplément des 60 ECTS de l'année. Elle est valorisée dans le supplément au diplôme. L'accumulation de crédits affectés à des UE facultatives ne contribue pas à la validation de semestres ni à la délivrance d'un diplôme.

ECTS : EUROPEAN CREDITS TRANSFER SYSTEM

Les ECTS constituent l'unité de mesure commune des formations universitaires de licence et de master dans l'espace européen. Chaque UE obtenue est ainsi affectée d'un certain nombre d'ECTS (en général 30 par semestre d'enseignement, 60 par an). Le nombre d'ECTS varie en fonction de la charge globale de travail (CM, TD, TP, etc.) y compris le travail personnel. Le système des ECTS vise à faciliter la mobilité et la reconnaissance des diplômes en Europe.

TERMES ASSOCIÉS AUX DIPLOMES

Les diplômes sont déclinés en domaines, mentions et parcours.

DOMAINE

Le domaine correspond à un ensemble de formations relevant d'un champ disciplinaire ou professionnel commun. La plupart des formations de l'UT3 relèvent du domaine « Sciences, Technologies, Santé ».

MENTION

La mention correspond à un champ disciplinaire. Il s'agit du niveau principal de référence pour la définition des diplômes nationaux. La mention comprend, en général, plusieurs parcours.

PARCOURS

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

LICENCE CLASSIQUE

La licence classique est structurée en six semestres et permet de valider 180 crédits ECTS. Les UE peuvent être obligatoires, à choix ou facultatives. Le nombre d'ECTS d'une UE est fixé sur la base de 30 ECTS pour l'ensemble des UE obligatoires et à choix d'un semestre.

LICENCE FLEXIBLE

À la rentrée 2022, l'université Toulouse III - Paul Sabatier met en place une licence flexible. Le principe est d'offrir une progression "à la carte" grâce au choix d'unités d'enseignement (UE). Il s'agit donc d'un parcours de formation personnalisable et flexible dans la durée. La progression de l'étudiant·e dépend de son niveau de départ et de son rythme personnel. L'inscription à une UE ne peut être faite qu'à condition d'avoir validé les UE pré-requises. Le choix de l'itinéraire de la licence flexible se fait en concertation étroite avec une direction des études (DE) et dépend de la formation antérieure, des orientations scientifiques et du projet professionnel de l'étudiant·e. L'obtention du diplôme est soumise à la validation de 180 crédits ECTS.

DIRECTION DES ÉTUDES ET ENSEIGNANT·E RÉFÉRENT·E

La direction des études (DE) est constituée d'enseignantes et d'enseignants référents, d'une directrice ou d'un directeur des études et d'un secrétariat pédagogique. Elle organise le projet de formation de l'étudiant·e en proposant une individualisation de son parcours pouvant conduire à des aménagements. Elle est le lien entre l'étudiant·e, l'équipe pédagogique et l'administration.

TERMES ASSOCIÉS AUX ENSEIGNEMENTS

CM : COURS MAGISTRAL(AUX)

Cours dispensé en général devant un grand nombre d'étudiantes et d'étudiants (par exemple, une promotion entière), dans de grandes salles ou des amphithéâtres. Ce qui caractérise également le cours magistral est qu'il est le fait d'une enseignante ou d'un enseignant qui en définit les structures et les modalités. Même si ses contenus font l'objet de concertations avec l'équipe pédagogique, chaque cours magistral porte donc la marque de la personne qui le crée et le dispense.

TD : TRAVAUX DIRIGÉS

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

TP : TRAVAUX PRATIQUES

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

PROJET OU BUREAU D'ÉTUDE

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

TERRAIN

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

STAGE

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

SESSIONS D'ÉVALUATION

Il existe deux sessions d'évaluation : la session initiale et la seconde session (anciennement appelée "session de rattrapage", constituant une seconde chance). La session initiale peut être constituée d'examens partiels et terminaux ou de l'ensemble des épreuves de contrôle continu et d'un examen terminal. Les modalités de la seconde session peuvent être légèrement différentes selon les formations.

SILLON

Un sillon est un bloc de trois créneaux de deux heures d'enseignement. Chaque UE est généralement affectée à un sillon. Sauf cas particuliers, les UE positionnées dans un même sillon ont donc des emplois du temps incompatibles.


Université
de Toulouse