

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

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

HARMONISATION

OFFRE DE FORMATION MASTER

ACADEMIQUE

Etablissement	Faculté / Institut	Département
Université Docteur Moulay Tahar de Saïda	Faculté de sciences	Chimie

Domaine : Sciences de la matière

Filière : Chimie

Spécialité : Chimie théorique et computationnelle

Année universitaire : 2016/2017

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

مواظمة
عرض تكوين ماستر
أكاديمي

القسم	الكلية/ المعهد	المؤسسة
الكيمياء	كلية العلوم	جامعة الدكتور مولاي الطاهر بسعيدة

الميدان : علوم المادة

الشعبة : الكيمياء

التخصص : الكيمياء النظرية والحاسوبية

السنة الجامعية: 2017/2016

SOMMAIRE

I - Fiche d'identité du Master	4
1 - Localisation de la formation	5
2 - Partenaires de la formation	5
3 - Contexte et objectifs de la formation	5
A - Conditions d'accès	5
B - Objectifs de la formation	5
C - Profils et compétences visées	5
D - Potentialités régionales et nationales d'employabilité	5
E - Passerelles vers les autres spécialités	5
F - Indicateurs de suivi de la formation	5
G - Capacités d'encadrement	5
4 - Moyens humains disponibles	7
A - Enseignants intervenant dans la spécialité	7
B - Encadrement Externe	8
5 - Moyens matériels spécifiques disponibles	9
A - Laboratoires Pédagogiques et Equipements	9
B- Terrains de stage et formations en entreprise	9
C - Laboratoires de recherche de soutien au master	9
D - Projets de recherche de soutien au master	10
E - Espaces de travaux personnels et TIC	10
II - Fiche d'organisation semestrielle des enseignement	11
1- Semestre 1	12
2- Semestre 2	13
3- Semestre 3	14
4- Semestre 4	15
5- Récapitulatif global de la formation	15
III - Programme détaillé par matière	16
IV – Accords / conventions	42

I – Fiche d'identité du Master

1 - Localisation de la formation :

Faculté : Technologie

Département : Chimie

2- Partenaires de la formation *:

Des enseignants chercheurs de différents grades des **universités de Sidi Bel Abbes et de Tlemcen** participent à l'encadrement de ce master.

3 – Contexte et objectifs de la formation

A – Conditions d'accès

Avoir une licence en chimie des domaines SM et ST.

B - Objectifs de la formation

La *chimie computationnelle* est un domaine relativement nouveau. La formation dans ce domaine n'est dispensée que depuis quelques années dans quelques universités dans le monde. Il concerne le développement, la création, l'organisation, le stockage, la diffusion, l'analyse, la visualisation et l'utilisation de l'information chimique. Des méthodes de la chimie computationnelle telles que la modélisation moléculaire, relations structure activité, relation structure propriété, et fouille de données sont devenues actuellement indispensables pour le développement de nouveaux composés, matériaux et processus. Le Master proposé en Chimie computationnelle devrait succéder au magister chimie computationnelle créé à l'institut des sciences exactes du centre universitaire de Saida en 2003.

Ce Master a pour objectif de former de spécialistes pour les universités, les centres de recherches, l'industrie chimique, l'industrie pétrochimique et l'industrie pharmaceutique ayant des compétences solides en chimie, en informatique de base ainsi que dans les méthodes de modélisation et les méthodes spécifiques de la chemo-informatique. Les programmes des enseignements contiendront tous les éléments qui permettront aux étudiants d'approfondir leurs connaissances soit dans les techniques de traitement de données soit dans les domaines d'application de la chimie quantique, de modélisation moléculaires. L'encadrement sera assuré par des enseignants chercheurs spécialistes en chimie, en informatique et en chimie computationnelle.

C – Profils et compétences métiers visés

Les diplômés de ce master auront acquis des compétences dans quatre domaines : la chimie, l'informatique, la modélisation moléculaire et le traitement automatique de l'information chimique. Ils auront les compétences requises pour mener des travaux de recherche qui font appel à ces différentes spécialités.

D- Potentialités régionales et nationales d'employabilité des diplômés

- Universités
- Centres de recherche
- Entreprise spécialisée dans les domaines de chimie, hydrocarbures, et produits pharmaceutiques

E – Passerelles vers d'autres spécialités

Tout master du groupe chimie théorique et computationnelle.

F – Indicateurs de suivi de la formation

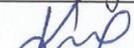
Evaluation interne par des enseignants du master ou des chercheurs des laboratoires concernés.

G – Capacité d'encadrement

10 étudiants

4 – Moyens humains disponibles

A : Enseignants de l'établissement intervenant dans la spécialité :

Nom, prénom	Diplôme graduation + Spécialité	Diplôme Post graduation + Spécialité	Grade	Type d'intervention	Emargement
RAHMOUNI Ali	DES en Chimie	Doctorat d'état en Chimie théorique et Informatique	Pr.	Cours, TD, TP, encadrement de mémoire	
MOSTEFAI ASMA	DES en Chimie	Doctorat en Chimie	MCA	Cours, TD, TP, encadrement de mémoire	
BRAHIM HOUARI	DES en Chimie	Doctorat en Chimie	MCA	Cours, TD, TP, encadrement de mémoire	
ARICHE BERKANE	DES en Chimie	Doctorat en Chimie	MCB	Cours, TD, TP, encadrement de mémoire	
ADJIR NOUREDDINE	Ingénieur en Informatique	Doctorat en Informatique	MCB	Cours, TD, TP	
KHATER MAAMAR	Ingénieur en Informatique	Doctorat en Informatique	MCB	Cours, TD, TP	
ALLALI KOUIDER	DES en Chimie	Magister en Informatique	MAA	Cours, TD, TP, encadrement de mémoire	
DOUMI NOUREDDINE	Ingénieur en Informatique	Magister en Informatique	MAA	Cours, TD, TP, encadrement de mémoire	
FELLAH AISSA	Ingénieur en Informatique	Magister en Informatique	MAA	Cours, TD, TP, encadrement de mémoire	
MOKADEM DJELLOUL	Ingénieur en Informatique	Magister en Informatique	MAA	Cours, TD, TP, encadrement de mémoire	
HOUACINE ABDELKRIM	Ingénieur en Informatique	Magister en Informatique	MAA	Cours, TD, TP	

TAMI ABDELAZIZ	Ingénieur en Informatique	Magister en Informatique	MAB	Cours, TD, TP	
----------------	---------------------------	--------------------------	-----	---------------	---

B : Encadrement Externe :

Etablissement de rattachement : Université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbes

Nom, prénom	Diplôme graduation + Spécialité	Diplôme Post graduation + Spécialité	Grade	Type d'intervention *	Emargement
BENBRAHIM NACERA	DES en Chimie	Doctorat en Chimie	MCB	Cours, TD, TP, encadrement de mémoire	

5 – Moyens matériels spécifiques disponibles

A- Laboratoires Pédagogiques et Equipements :

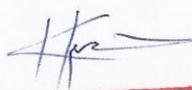
Intitulé du laboratoire : Centre de calcul

N°	Intitulé de l'équipement	Nombre	observations
01	Micro-ordinateurs	20	

B- Terrains de stage et formation en entreprise :

Aucun stage n'est prévu dans des entreprises

C- Laboratoire(s) de recherche de soutien au master :

Chef du laboratoire : Rahmouni Ali
N° Agrément du laboratoire : Mai 2002
Date : 23/03/2016
Avis du chef de laboratoire : <i>Avis favorable</i> 



D- Projet(s) de recherche de soutien au master :

Intitulé du projet de recherche	Code du projet	Date du début du projet	Date de fin du projet
Etude des propriétés thermodynamiques et structurales de systèmes micellaires	E03620100020	Janvier 2011	Décembre 2013
Valorisation des plantes de la région de la willaya de Saida	F03620090004	Janvier 2010	Décembre 2012

E- Espaces de travaux personnels et TIC :

- Plusieurs salles de lectures disponibles au niveau des bibliothèques de l'université de Saida.
- Salles d'internet
- Salles du centre de calcul
- Locaux du laboratoire de modélisation et de méthodes de calcul

II – Fiche d'organisation semestrielle des enseignements

1- Semestre 1 :

Unité d'Enseignement	VHS	V.H hebdomadaire				Coeff	Crédits	Mode d'évaluation	
	14-16 sem	C	TD	TP	Autres			Continu	Examen
UE fondamentales									
UEF11	202h30	7h30	4h30	1h30		9	18		
Chimie quantique	67h30	3h00	1h30			3	6	+	+
Chimie organique	45h	1h30	1h30			2	4	+	+
Thermodynamique statistique	22h30	1h30				1	2		+
Introduction à l'informatique et à l'algorithmique	67h30	1h30	1h30	1h30		3	6	+	+
UE méthodologie									
UEM11	105h	2h30	1h30	3h00		5	9		
Outils mathématiques pour la chimie	60h	2h30	1h30			3	6	+	+
Système d'exploitation	45h			3h00		2	3	+	
UE découverte									
UED11	45h	1h30	1h30			2	2		
Architecture des ordinateurs	45h	1h30	1h30			2	2	+	+
UE transversales									
UET11	22h30	1h30				1	1		
Anglais technique	22h30	1h30				1	1	+	
Total Semestre 1	375h	13h00	7h30	4h30		17	30		

2- Semestre 2 :

Unité d'Enseignement	VHS	V.H hebdomadaire				Coeff	Crédits	Mode d'évaluation	
	14-16 sem	C	TD	TP	Autres			Continu	Examen
UE fondamentales									
UEF21	202h30	7h30	4h30	1h30		9	18		
Méthodes non quantiques de modélisation moléculaire	67h30	3h	1h30			3	6	+	+
Méthodes physiques d'analyse	45h	1h30	1h30			2	4	+	+
Maths pour la chimie	22h30	1h30				1	2		+
Algorithmique avancé	67h30	1h30	1h30	1h30		3	6	+	+
UE méthodologie									
UEM21	105h	1h30	1h30	4h		5	9		
Atelier de calculs quantiques	45h			3h		2	4	+	
Bases de données	60h	1h30	1h30	1h		3	5	+	+
UE découverte									
UED21	22h30	1h30				1	1		
Réseaux et Internet	22h30	1h30				1	1		+
UE transversales									
UET21	45h	1h30		1h30		2	2		
Aspects théoriques de la réactivité	45h	1h30		1h30		2	2	+	+
Total Semestre 2	375h	12h	6h	7h		17	30		

3- Semestre 3 :

Unité d'Enseignement	VHS	V.H hebdomadaire				Coeff	Crédits	Mode d'évaluation	
	14-16 sem	C	TD	TP	Autres			Continu	Examen
UE fondamentales									
UEF31	202h30	6h00	4h30	3h00		9	18		
Chimie de surface	45h	1h30	1h30			2	4	+	+
Modélisation des interactions intermoléculaires et effets de solvant	45h	1h30		1h30		2	4	+	+
Chimie de coordination et catalyse	45h	1h30	1h30			2	4	+	+
La conception orientée objet	67h30	1h30	1h30	1h30		3	6	+	+
UE méthodologie									
UEM31	105h	1h30		5h30		5	9		
Web et bases de données	45h	1h30		1h30		2	4	+	+
Atelier de méthodes non quantiques de modélisation moléculaire	60h			4h		3	5	+	
UE découverte									
UED31	45h00	1h30	1h30			2	2		
Introduction à l'intelligence artificielle	45h00	1h30	1h30			2	2	+	+
UE transversale									
UET31	22h30	1h30				1	1		
Initiation aux méthodes de la recherche bibliographique	22h30	1h30				1	1	+	
Total Semestre 3	375h	10h30	6h00	8h30		17	30		

4- Semestre 4 :

Domaine : Sciences de la matière
Filière : Chimie
Spécialité : Chimie théorique et computationnelle

Stage en entreprise sanctionné par un mémoire et une soutenance.

	VHS	Coeff	Crédits
Travail Personnel	200h		
Stage dans un laboratoire de recherche	350h	1	30
Séminaires	0		
Autre	0		
Total Semestre 4	550h		30

5- Récapitulatif global de la formation : (indiquer le VH global séparé en cours, TD, pour les 04 semestres d'enseignement, pour les différents types d'UE)

VH \ UE	UEF	UEM	UED	UET	Total
Cours	315	82.5	67.5	67.5	532.5
TD	202.5	45	45	0	292.5
TP	90	187.5	0	22.5	300
Travail personnel	260	30	30	30	350
Autre	0	0	0	0	0
Total	667.5	345	142.5	120	1257
Crédits	84	27	5	4	120
% en crédits pour chaque UE	70.00%	22.50%	4.17%	3.33%	

III - Programme détaillé par matière

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 1

Intitulé de l'UE : UEF11

Intitulé de la matière : Chimie quantique

Crédits : 5

Coefficients : 3

Objectifs de l'enseignement :

Les fondements de la mécanique quantique, et les méthodes ab initio et semi empiriques au niveau Hartree- Fock seront développées dans ce cours.

Connaître la théorie et l'application de la théorie de la fonctionnelle de la densité.

Connaissances préalables recommandées

Notions de base en mathématique et en physiques

Contenu de la matière :

Fondements de la mécanique quantique

Les postulats de la mécanique

Etudes de problèmes simples

Les méthodes d'approximations

Les Méthodes du champs auto cohérent

Le champs auto cohérent

Orbitales développées dans une base d'orbitales atomiques

Les méthodes de calcul ab initio

Les méthodes semi-empiriques

La localisation des orbitales moléculaires

Au-delà de Hartree-Fock

La faillite des méthodes monconfigurationnelles

la corrélation électronique

L'interaction de configuration variationnelle

Les méthodes des perturbations.

Les méthodes des paires d'électrons (Coupled-Cluster)

Les méthodes MCSCF

Les méthodes multiréférences.

Théorie de la fonctionnelle de la densité

Fondements de la DFT. Théorèmes de Hohenberg et Kohn.

Modèles de Thomas-Fermi et Thomas-Fermi-Dirac

Méthode Khon-Sham

Matrices densité et trou d'échange-corrélation

Fonctionnelles corrigées du gradient

Fonctionnelles hybrides

Principaux programmes de DFT

Mode d'évaluation : *Examen+ Contrôle continu*

Références

1. Titre : Mécanique quantique
Auteur : Cohen Tanoudji
Editeur : Hermann
2. Titre : Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory
Auteur : Attila Szabo Neil S. Ostlund
Editeur : MacGraw-Hill, Inc.
3. Titre : Quantum Chemistry
Auteur : John P. Lowe
Editeur : Academic Press
4. A Chemist's Guide to Density Functional Theory,
Auteurs : Wolfram Koch, Max C. Holthausen
Editeur : Wiley-VCH
5. Modern Density Functional Theory: A Tool For Chemistry
Auteur : **J. M. Seminario**
Editeur : Elsevier
6. Principles and Applications of Density Functional Theory in Inorganic Chemistry I (Structure and Bonding, Volume 112)
Auteurs : Nikolas Kaltsoyannis, John E. McGrady
Editeur : Springer
7. Titre : Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory
Auteur : Attila Szabo Neil S. Ostlund
Editeur : MacGraw-Hill, Inc.
8. Titre : Quantum Chemistry
Auteur : John P. Lowe
Editeur : Academic Press
9. Titre : Eléments de chimie quantique à l'usage des chimistes,
Auteur : Jean-Louis Rivail
Editeur : EDP sciences

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 1

Intitulé de l'UE : UEF11

Intitulé de la matière : Chimie organique

Crédits : 4

Coefficients : 2

Objectifs de l'enseignement :

Réactions de substitution électrophiles aromatiques

Réaction d'oxydation et de réduction

Réactions d'allongements des chaînes carbonées

Connaissances préalables recommandées

Chimie organique générale

Contenu de la matière :

Rappels :

- Le carbone : hybridation (sp, sp², sp³) et intermédiaire réactionnels (carbocation, carbanion, radicale carbonée et carbène)
- Chiralité et Asymétrie, conformation des systèmes (acycliques et cycliques exemple les dérivés du cyclohexane), les énantiomères, les diastéréoisomères, les épimères et les anomères, règle de GRAM et FELKIN

1 Mécanisme réactionnel de base

- Réaction de substitution nucléophile : SN¹ et SN²
- Réaction d'élimination : E¹ et E²
- Réaction d'addition

2 Réactions de substitution électrophiles aromatiques

- Mécanisme réactionnel les complexes σ et π .
- Diverses substitutions, halogénéation, nitration, sulfonation, alkylation, cyclisation par acylation

3 Réaction d'oxydation

- Oxydation des hydrocarbures linéaires, aromatiques, des alcools, des alcènes, et des cétones

4 Réaction réduction

- Hydrogénation catalytique homogène et hétérogène
- Par métaux dissout : alcènes, alcynes, cétones, cétones $\alpha\beta$ insaturées, aromatiques.
- Hydrures d'aluminium et de bore.
- Wolf-Kischner.

Mode d'évaluation : Examen+ Contrôle continu

Référence Bibliographique

- Allinger. Cava. Chimie organique. Edition Universitaire McGRAW-HILL 1984
- H.Meislich, H.Nechamkin. Chimie Organique Théorie et Problème. Edition Série Schaum 1977

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 1

Intitulé de l'UE : UEF11

Intitulé de la matière : Thermodynamique statistique

Crédits : 2

Coefficients : 1

Objectifs de l'enseignement

Les différents ensembles statistiques, les fluctuations et la condition d'équivalence entre les ensembles font l'objet de ce cours.

Connaissances préalables recommandées

Avoir des notions de base sur les grandeurs thermodynamiques

Contenu de la matière :

Les Ensembles Statistiques

- a. La notion d'ensemble statistique
- b. L'ensemble canonique
- c. Température et entropie en thermodynamique statistique
- d. Autres ensembles statistiques
- e. Fluctuations et condition d'équivalence entre les ensembles

Mode d'évaluation : *Examen*

Références

1. Titre : Thermodynamique statistique
Auteur : C. Chahine, P. Devaux
Editeur : DUNOD
2. Titre : Thermodynamique statistique
Auteur : M. Le Bellac, F. Mortessagne
Editeur : DUNOD
3. Titre : Thermodynamique et mécanique statistique
Auteur : Griner Neise Stöcker
Editeur : SPRINGER
4. Titre : Physique statistique et thermodynamique
Auteur : C. Coulon et S. Moreau
Editeur : DUNOD

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 1

Intitulé de l'UE : UEF11

Intitulé de la matière : Introduction à l'informatique et à l'algorithmique

Crédits : 5

Coefficients : 3

Objectifs de l'enseignement

Introduire l'étudiant aux notions préliminaires d'informatique et d'algorithmique lui permettant de franchir ultérieurement des problèmes algorithmiques avancés

Les séances de TP sont consacrées à l'apprentissage d'un langage de programmation algorithmique dans un environnement à interface graphique, on recommande les langages suivants : C, Pascal, Fortran etc... et on recommande les environnements ; Eclipse, Turbo pascal, Visual Fortran etc...

Connaissances préalables recommandées

Connaissances légères de l'ordinateur et de l'informatique

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Introduction

Chapitre 2 : Les algorithmes séquentiels simples

- Parties d'un algorithme

- Les données

- Types

- Opérations de base

Chapitre 3 : Les structures conditionnelles

- Structure conditionnelle simple

- Structure conditionnelle composée

- Structure conditionnel multiple

Chapitre 4 : Les boucles

- La boucle Tant que

- La boucle Répéter

- La boucle Pour

Chapitre 5 : Les tableaux et les chaînes de caractères

- Le type tableau

- Les chaînes de caractères

Chapitre 6 : Les sous-programmes : Procédures et Fonctions

- Les sous-programmes

- Les variables locales et les variables globales

- Le passage des paramètres

Chapitre 7 : La complexité des algorithmes

Mode d'évaluation : *Examen+contrôle continu*

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 1

Intitulé de l'UE : UEM11

Intitulé de la matière : Outils mathématiques pour la chimie

Crédits : 6

Coefficients : 4

Objectifs de l'enseignement

Rappels et mise à niveau de connaissances en mathématique nécessaires pour la chimie quantique.

Connaissances préalables recommandées

Connaissances de bases en algèbre et analyse (programmes des 2 premières années de licence)

Contenu de la matière :

- Outils mathématiques pour la mécanique quantique

Mode d'évaluation : *Examen+ Contrôle continu*

Références

1. Mécanique quantique
Auteurs :Cohen Tanoudji
Editeur : Hermann
2. Statistique et probabilités
Auteurs : Jean-Pierre Lecoutre
Editeur : Éco Sup, Dunod
3. Processus stochastiques
Auteurs : Dominique Foata, Aimé Fuchs
Editeur : Sciences Sup, Dunod
4. *Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation. Cours et exercices corrigés,*
Auteur : CIARLET Philippe G, Editeur : Lavoisier, 2006

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 1

Intitulé de l'UE : UEM11

Intitulé de la matière : Système d'exploitation

Crédits : 4

Intitulé de la matière :

Objectifs de l'enseignement

Dans cette matière on expose les principes de fonctionnement d'un système informatique de son côté logiciel de base, i.e. la gestion et l'exploitation des différentes ressources matériel nécessaires à l'accomplissement d'une tâche utilisateur.

Le TP est consacré à l'application des notions théoriques acquises sur Linux.

Connaissances préalables recommandées

Algorithmique de base et architecture des ordinateurs

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Introduction aux systèmes d'exploitation

Chapitre 3 : Gestion du processus

Chapitre 4 : Gestion de la mémoire

Chapitre 7 : Gestion de fichiers

Références

Abraham Silberschatz & Peter B. Galvin, Principes des systèmes d'exploitation.

Andrew Tanenbaum, Systèmes d'exploitation

A. BElkheir, Systèmes d'exploitation, mécanismes de base

Mode d'évaluation : *Contrôle continu*

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 1

Intitulé de l'UE : UED11

Intitulé de la matière : Architecture des ordinateurs

Crédits : 3

Coefficients : 1

Objectifs de l'enseignement

Cette matière introduit à l'étudiant les blocs fonctionnels de l'ordinateur et leurs principaux composants, lui permettant de comprendre comment se fait le traitement de l'information à l'intérieur de l'ordinateur

Connaissances préalables recommandées

Aucune

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Architecture générale des ordinateurs

Chapitre 2 : Représentation de l'information

Chapitre 3 : Architecture de Von Neuman

Chapitre 4 : Programmation assembleur

Chapitre 5 : Les architectures parallèles

Mode d'évaluation : *Examen+contrôle continu*

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 1

Intitulé de l'UE : UET11

Intitulé de la matière : Anglais technique

Crédits : 1

Coefficients : 1

Objectifs de l'enseignement

Communication écrite et orale

Connaissances préalables recommandées

Anglais général

Contenu de la matière :

L'anglais est considéré comme la langue internationale de la science et de la technologie. Il est indispensable d'équiper les étudiants de master à cet outil qui les aidera dans leurs recherches. Signalons que les 2/3 de la documentation scientifique et technique sont en langue anglaise. Ce cours est alors proposé dans l'objectif de diagnostiquer les faiblesses des étudiants en anglais qui sont dus soit à l'inexistence de l'anglais durant quelques années de cursus universitaire, soit au volume horaire très insuffisant alloué au module d'anglais. Dans un premier temps, nous allons consacrer plusieurs séances de consolidation de l'anglais général afin de rafraichir les mémoires et de combler les lacunes des étudiants. Puis, nous proposerons toute une série d'exercices liés à l'anglais technique afin de faciliter aux étudiants la communication écrite et/ou orale). A la fin de ces cours l'étudiant sera capable de lire et même de rédiger les articles sur des thèmes de la chimie en anglais.

Mode d'évaluation : *Contrôle continu*

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 2

Intitulé de l'UE : UEF21

Intitulé de la matière : Méthodes non quantiques de modélisation moléculaire

Crédits : 5

Coefficients : 3

Objectifs de l'enseignement :

Avoir des connaissances de bases sur les méthodes de la dynamique moléculaire et de Monté Carlo.

Acquérir un fondement solide en mécanique moléculaire.

Connaissances préalables recommandées :

Chimie physique

Spectroscopie vibrationnelle- analyse conformationnelle

Contenu de la matière :

- Dynamique moléculaire
- Méthode de Monte Carlo
- Grandeurs dérivées de l'énergie stérique
- Méthodologie de la mécanique moléculaire
- Applications

Mode d'évaluation : *Examen + contrôle continu*

Références bibliographiques :

- An Introduction to Computer Simulation.
M. M. Wolfson and G. J. Pert, University of York, OXFORD UNIVERSITY PRESS, 1999.
- Introduction to Molecular-Microsimulation of Colloidal Dispersions.
- Satoh, Faculty of System Science and Technology, Akita Prefectural University, Japan, ELSEVIER, 2003.
- A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, *Second Edition*.
David P. Landau, Kurt Binder, Cambridge University Press, 2005.
- Molecular Modelling for Beginners.
Alan Hinchliffe, UMIST, Manchester, UK, John Wiley and Sons Ltd, 2003.
- Monte Carlo Methods in Chemical Physics.
David M. Ferguson, J. Ilja Siepmann, Donald G. Truhlar, John Wiley and Sons Ltd, 1999.
- Nanomaterials: Design and Simulation.
Perla B. Balbuena, Jorge M. Seminario, Texas A&M University College Station, Texas, USA. Elsevier, 2007.
- U. Burkert and N.L. Allinger, Molecular Mechanics, American Chemical Society 1982.
- O. Becker, A.D. MacKerell, Jr., B. Roux and M. Watanabe, Editors, Computational Biochemistry and Biophysics, Marcel Dekker Inc., New York, 2001.
- G. M. Keserü, I. Kolossváry, Molecular mechanics and conformational analysis in drug design, Wiley-Blackwell, 1999.
- Christopher J. Cramer, Essentials of computational chemistry: theories and models, John Wiley and Sons, 2004

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 2

Intitulé de l'UE : UEF21

Crédits : 3

Coefficients : 2

Intitulé de la matière: Méthodes physique d'analyse

Objectifs de l'enseignement

Acquérir des notions de base théoriques et pratiques de l'analyse structurale et élémentaire par les méthodes spectroscopiques. Les compétences développées sont l'analyse, l'interprétation des spectres et la caractérisation de composés organiques ainsi que la perception de l'aspect complémentaire des techniques utilisées.

Connaissances préalables recommandées

- Cours de base en Chimie Organique
- Cours de base en Chimie Physique

Contenu de la matière :

Le cours insiste sur la complémentarité des méthodes spectroscopiques parmi lesquelles la spectroscopie infrarouge, la spectroscopie UV-Visible, la spectrométrie de masse et la résonance magnétique nucléaire qui constitue en elle même une partie importante du cours. Elle vient en complément des notions introduites en Chimie Organique et en Chimie Physique. L'utilisation de la RMN du ^1H et de ^{13}C est largement illustrée. Le cours fait une large part à la résolution d'exercices et de problèmes de complexité croissante, en synchronisation avec les techniques progressivement vues au cours .

Mode d'évaluation : *Examen + Contrôle continu*

Référence Bibliographique

- Allinger. Cava. Chimie organique. Edition Universitaire McGRAW-HILL 1984
- D.Lobadovsky. METHODIX Chimie. Edition Ellipses 2000

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 2

Intitulé de l'UE : UEF21

Intitulé de la matière : Aspects théoriques de la réactivité

Crédits : 2

Coefficients : 2

Objectifs de l'enseignement :

Etude de la réactivité chimique sous un angle théorique.

Utilisation des indices de la réactivité dans la prédiction des sites réactionnels

Connaissances préalables recommandées

Chimie organique générale

Chimie physique

Contenu de la matière :

- Notion de surface et de courbe de potentiel. Les points stationnaires (réactifs, produits, états de transition, intermédiaires) et leur caractérisation.
- Les diagrammes de corrélation: corrélation orbitale/corrélation d'états. Exemples d'utilisation.
- Contrôle orbitalaire ou/et contrôle de charge de la réactivité: définition, mise en oeuvre, limitations.
- Indices de la réactivité.

Mode d'évaluation : *Examen + contrôle continu*

Références :

1- Jensen, F. in : Introduction to Computational Chemistry, Wiley-VCH, New York, 2001.

2- J-L . Rivail, Elément de Chimie quantique à l'usage des chimistes, Paris, inter Edition/ CNRS, 316, 386, (1989).

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 2

Intitulé de l'UE : UEF21

Intitulé de la matière : Algorithmique avancée

Crédits : 5

Coefficients : 3

Objectifs de l'enseignement

Dans cette matière l'étudiant apprendra les structures de données avancées telles que l'allocation dynamique de mémoire centrale, les structures de données complexes telles que les arbres et les graphes ainsi que la calculabilité et décidabilités des algorithmes

Connaissances préalables recommandées

Algorithmique de base et architecture des ordinateurs

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Rappel

Chapitre 2 : Les types définis par l'utilisateur

Chapitre 3 : Les fichiers

Chapitre 4 : Les listes chaînées

Chapitre 5 : Les arbres

Chapitre 6 : Les graphes

Chapitre 7 : Les tables de hachage

Chapitre 8 : Calculabilité et décidabilité

Mode d'évaluation : *Examen+contrôle continu*

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 2

Intitulé de l'UE : UEM21

Intitulé de la matière : Atelier de calculs quantiques

Crédits : 5

Coefficients : 2

Objectifs de l'enseignement

Se Familiariser avec les logiciels de chimie quantique, comme : Gaussian(03), hyperchem, Gamess

Visualisation des molécules chimique à l'aide des interfaces graphiques tel que gaussview et MOLDEN.

Connaissances préalables recommandées

Chimie quantique, informatique

Contenu de la matière :

- I- Utilisation des interfaces graphiques Molden et gaussview dans la génération et la visualisation de la structure tridimensionnelle des molécules chimiques :
- II- Calculs de chimie quantique en utilisant les logiciels : Gaussian(03), hyperchem, Gamess :
 - Calculs d'optimisation de géométrie, Calculs de fréquence.
 - Etude de la structure électronique et détermination de quelques propriétés électronique : calculs de charges, détermination du moment dipolaire, détermination des énergies et de coefficients des orbitales frontières.
- III- Visualisation de la forme des orbitales atomiques, de la densité électronique et du volume moléculaire.
- IV- Etude de quelques réactions chimiques tel que la réaction SN2.

Mode d'évaluation : Contrôle continu

Références :

Help des logiciels Gaussian(03), hyperchem et Gamess en line.

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 2

Intitulé de l'UE : UEM21

Intitulé de la matière : Bases de données

Crédits : 5

Coefficients : 3

Objectifs de l'enseignement

Comprendre les objectifs, les architectures et les langages des bases de données. Maîtriser les fondements théoriques et les algorithmes des bases des systèmes de gestion de base de données, depuis la conception de base de données jusqu'au traitement de requêtes et le gestion de transactions. Le module s'appuie sur le modèle relationnel et les langages associés, en particulier SQL et sur un SGBD (par exemple MYSQL ou oracle).

Connaissances préalables recommandées

Algorithmique de base, théorie des ensembles et architecture des ordinateurs

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Introduction

Besoin de SGBD dans les applications

Objectifs des SGBD

Modélisation des données et niveaux d'abstraction

Modélisation Entité/Association

Modèle relationnel.

Chapitre 2 : Les langages relationnels

L'algèbre relationnelle

Langages prédicatifs et SQL (Interrogation d'une base de données en SQL: requêtes simples, requêtes imbriquées, agrégats et groupement).

Chapitre 3 : Conception et optimisation de schéma relationnel

Notion de redondance

Dépendance fonctionnels déduction et couverture minimale

Formes normales.

Chapitre 4 : Architecture

Introduction: différentes étapes d'analyse d'une requête (interprétation, optimisation).

Définition et modification d'une bdd en SQL

Création des tables, insertion, suppression et mise à jour des données

Création d'index primaire et secondaire.

Contrôles d'intégrités et:typologies, vérification,Trigger.

Contrôles de concurrences:notion transaction, sérialisation verrouillage, ordonnancement.

Les reprises après pannes. (journalisation,validation, reprise à froid et à chaud)

Mode d'évaluation : *Examen+contrôle continu*

Référence

Georges Gardarin, Bases de données:objet et relationnel.Eyroles, 1999.

Ragh Ramakrishnan,Johannes Gehrke.Database Management Systèms.Mc Graw-Hill, 1999.

Tamer Özsu,patrik Valduriez, Principes of Distributed Data Systèms.,Prentice Hall, 1999

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 2

Intitulé de l'UE : UED21

Intitulé de la matière : Réseaux et Internet

Crédits : 2

Coefficients : 1

Objectifs de l'enseignement

Dans cette matière on apprendra les notions de bases de la téléinformatique de la transmission et des réseaux locaux

Connaissances préalables recommandées

Connaissances mathématiques légères

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Introduction aux réseaux informatique

Chapitre 2 : Les réseaux locaux

Chapitre 3 : TCP/IP

Chapitre 4 : Les langages de balisage du web

Mode d'évaluation : *Examen*

Référence :

Andrew Tanenbaum, Réseaux cours et exercices, 3^{ème} édition 1999

Guy Pujolle, Les réseaux, 2^{ème} édition

Stéphane Iohier & Dominique Présent & Christian Panetto, 2^{ème} édition

Guy Pujolle, Cours réseaux et télécoms

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 2

Intitulé de l'UE : UET21

Intitulé de la matière : Maths pour la chimie

Crédits : 3

Coefficients : 1

Objectifs de l'enseignement

Rappels et mise à niveau de connaissances en mathématiques nécessaires pour la chimie.

Connaissances préalables recommandées

Connaissances de bases en algèbre et analyse (programmes des 2 premières années de licence)

Contenu de la matière :

- Mise à niveau en algèbre linéaire (Vecteurs, Matrices)
- Techniques d'analyse numérique.
- Mise à niveau en probabilité statistique
- Processus stochastiques et chaînes de Markov

Mode d'évaluation : *Examen*

Références

1. Mécanique quantique
Auteurs :Cohen Tanoudji
Editeur : Hermann
2. Statistique et probabilités
Auteurs : Jean-Pierre Lecoutre
Editeur : Éco Sup, Dunod
3. Processus stochastiques
Auteurs : Dominique Foata, Aimé Fuchs
Editeur : Sciences Sup, Dunod
4. *Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation. Cours et exercices corrigés,*
Auteur : CIARLET Philippe G,
Editeur : Lavoisier, 2006,

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 3

Intitulé de l'UE : UEF11

Intitulé de la matière : Chimie de surface

Crédits : 4

Coefficients : 2

Objectifs de l'enseignement :

Acquérir les connaissances en chimie analytique et la chimie de surface

Modélisation de la réactivité de composés organiques ou minéraux dans les différentes composantes de l'environnement (eau, sols, déchets, atmosphère,...).

Connaissances préalables recommandées

Chimie générale- chimie minérale

Contenu de la matière :

Partie I : chimie analytique

- l'équilibre acido-basique
- les équilibres de complexation
- les réactions d'oxydoréduction
- la réaction de formation de composés peu solubles.

Partie II. Chimie de surfaces

- Notion de la tension activité
- Système dispersé
- Adsorption physique des gazes sur les solides

Mode d'évaluation : *Examen+ Contrôle continu*

Références bibliographiques :

- Chimie analytique en solution - Cours et applications, Jean-Louis Brisset , Ahmed Addou , Mustapha Draoui , David Moussa : Collectif Broché (2005), Edition : Tec & Doc
- **Chimie analytique Équilibres en solution**, Michel Guernet, **Guernet** Élisabeth, Christine Herrenknecht-Trottmann, Edition : DUNOD, **2006**.
- **Chimie des surfaces, introduction à la catalyse**, semche eddine chitour, OPU, 1981.

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 3

Intitulé de l'UE : UEF31

Intitulé de la matière : Modélisation des interactions intermoléculaires et effets de solvant

Crédits : 4

Coefficients : 2

Objectifs de l'enseignement :

Traitements des interactions intermoléculaires et les effets de solvant

Connaissances préalables recommandées :

Chimie physique- modélisation moléculaire

Contenu de la matière :

Traitements théoriques des interactions intermoléculaires

Principales composantes énergétiques

Traitement des interactions intermoléculaires par les méthodes de chimie quantique

Méthode de la supermolécule

Méthode des perturbations à grande distances

Méthodes des perturbations généralisées

Les interactions intermoléculaires à multicorps : Effet à multicorps

Additivité ou non additivité des termes d'interactions intermoléculaire

Traitement des effets à multicorps par la méthode de supermolécule

Modèles de représentation des effets de solvants

Modèles implicites

Modèles explicites

Modèles hybrides

Mode d'évaluation : Examen+Contrôle continu

Références bibliographiques :

- **Liaisons intermoléculaires.**
Alain Gerschel, Interéditions - CNRS Editions, 1995.
- **Molecular Electrostatic Potentials, Concepts and Applications.**
Edited by Jane S. Murray, Department of Chemistry, University of New Orleans,
New Orleans, LA 70148, USA
Kalidas Sen, School of Chemistry, University of Hyderabad, Hyderabad 500 046,
India, 1996, ELSEVIER.
- **Éléments de Chimie quantique à l'usage des chimistes.** Deuxième édition.
Jean-Louis Rivail, EDP SCIENCES/CNRS EDITIONS, 1999.
- **Essentials of Computational Chemistry, theories and models.**
Christopher J. Cramer, university of Minnesota, USA, JOHN WILEY AND SONS, LTD, 2002.
- **VALENCY AND BONDING, A Natural Bond Orbital Donor–Acceptor Perspective.**
FRANK WEINHOLD AND CLARK R. LANDIS, Department of Chemistry, University of
Wisconsin-Madison,
Cambridge University Press, 2005
- **Intermolecular Interactions: Physical Picture, Computational Methods and Model Potentials.**
Ilya G. Kaplan, Universidad Nacional Autonoma de México, Mexico, John Wiley and Sons Ltd,
2006.

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 3

Intitulé de l'UE : UEF11

Intitulé de la matière : Chimie de coordination et catalyse

Crédits : 3

Coefficients : 2

Objectifs de l'enseignement

Se familiariser avec les concepts de la chimie organométallique.

Etude de la structure et de la réactivité de composés des métaux de transition.

Savoir élaborer un schéma réactionnel de chimie organométallique

Connaissances préalables recommandées

Notions de chimie quantique, de théorie des groupes, de spectroscopie moléculaire, de mécanismes réactionnels et de chimie inorganique.

Contenu de la matière :

Ce cours est consacré à l'étude des différentes classes fondamentales de composés de la chimie organométallique des métaux de transition (leurs synthèses et les principes de leurs structures). Après une première partie retraçant l'histoire et jetant les bases de la chimie de coordination, la réactivité des complexes organométalliques ainsi que les notions de bases de la catalyse homogène seront abordés dans une seconde partie.

Mode d'évaluation : *Examen + Contrôle continu*

Référence Bibliographique

- Jacques Mesplède. Architecture Moléculaire et Chimie Organique. Edition Fabienne Loup-Brunswick. Bréal 2000

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 3

Intitulé de l'UE : UEF31

Intitulé de la matière : La conception orientée objet

Crédits : 5

Coefficients : 3

Objectifs de l'enseignement

Dans cette matière l'étudiant apprendra la modélisation des données en classes d'objet, ceci conformément à un langage de modélisation tel qu'UML.

Le TP est consacré à l'application des notions d'objet dans un langage de programmation comme Java.

Connaissances préalables recommandées

Algorithmique de base, algorithmique avancée et architecture d'ordinateur.

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Les concepts de l'orientée objet

Chapitre 2 : Modélisation UML

Chapitre 3 : La gestion de projet

Mode d'évaluation : *Examen+contrôle continu*

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 3

Intitulé de l'UE : UEM31

Intitulé de la matière : Web et bases de données

Crédits : 5

Coefficients : 2

Objectifs de l'enseignement

Dans le web, les données sont organisées en format libre, semi structuré ou structuré, l'objectif de cette matière est d'exposer les technologies nécessaires à la mise en oeuvre des bases de données dans le web et les formats semi structurés possibles qu'elles peuvent prendre.

Le TP est consacré à la modélisation des données dans une technologie de balisage semi structurée telle que XML et en utilisant une API telle que JDOM pour manipuler cette données.

Connaissances préalables recommandées

Bases de données et technologie d'Internet

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Rappels et approfondissements du relationnel

Chapitre 2 : Technologies web

Chapitre 3 : BDD et Web

Chapitre 4 : Modèles semi-structurés : XML

Mode d'évaluation : *Examen+contrôle continu*

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 3

Intitulé de l'UE : UEM31

Intitulé de la matière : Atelier de méthodes non quantiques de modélisation moléculaire

Crédits : 6

Coefficients : 3

Objectifs de l'enseignement

Acquérir des compétences dans l'utilisation des programmes gratuits de dynamique moléculaire et Monté Carlo.

Développement d'applications informatiques en modélisation moléculaire

Connaissances préalables recommandées

Méthodes de dynamiques moléculaire et de Monté Carlo

Algorithmique et méthodes de programmation

Informatique

Contenu de la matière :

- 1- Application de programmes gratuits de dynamique moléculaire dans l'étude des propriétés de divers systèmes.
- 2- Application de programmes gratuits de Monté Carlo dans l'étude des propriétés de divers systèmes.
- 3- Mise au point de programmes simples de dynamique moléculaire
- 4- Mise au point de programmes simples de Monté Carlo

Mode d'évaluation : Contrôle continu

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 3

Intitulé de l'UE : UED31

Intitulé de la matière : Introduction à l'intelligence artificielle

Crédits : 2

Coefficients : 1

Objectifs de l'enseignement

L'objectif de ce module est de fournir les bases d'une compréhension précise des techniques de l'intelligence artificielle. Le cours introduit les fondamentaux de l'IA en présentant un ensemble de problématique et de méthodes de base du domaine.

Connaissances préalables recommandées

Informatique générale, algorithmes et langages de programmation, bases de données, les paradigmes de programmation.

Contenu de la matière :

Chapitre 1 : Introduction à l'intelligence artificielle

Chapitre 2 : Apprentissage Automatique

Chapitre 3 : Les techniques d'optimisation

Chapitre 4 : Les techniques de data mining

Chapitre 5 : Application des techniques de l'IA en chimie

Analyse conformationnelle

Relation structure propriété

Mode d'évaluation : *Contrôle continu*

Intitulé du Master : Chimie théorique et computationnelle

Semestre : 3

Intitulé de l'UE : UET31

Intitulé de la matière : Initiation aux méthodes de la recherche bibliographique

Crédits : 1

Coefficients : 1

Objectifs de l'enseignement

Acquérir une méthode de recherche bibliographique rapide et efficace.

Savoir présenter les sources de bibliographie avec sérieux et rigueur.

Savoir faire une synthèse d'une recherche bibliographique.

Connaissances préalables recommandées

Maîtrise de la langue française et anglaise.

Contenu de la matière :

Définir un thème de recherche revient à déterminer les futures étapes de sa recherche et à en définir l'importance. Ce cours a pour but de proposer les étapes d'une recherche bibliographique idéale. Ces étapes peuvent se résumer ainsi :

Cerner le sujet de recherche, trouver les infos de base (Une encyclopédie permet de mettre à jour les connaissances générales sur un sujet et les bibliographies proposées permettent de préparer la recherche), trouver des livres sur le sujet, trouver les articles sur le sujet (un article offre, par rapport à un livre, une analyse plus précise sur un aspect spécifique d'une question), trouver des pages WEB avec un moteur de recherche, Rédiger sa bibliographie.

Mode d'évaluation : Contrôle continu

Références :

1- Michel Beaud ; L'art de la thèse. comment préparer et rédiger une thèse de doctorat, un mémoire de DEA ou de maîtrise ou tout autre travail universitaire. Editions la découverte, 2006.

2- Louise-Noëlle Malclès, *La bibliographie*, PUF, coll. "Que sais-je ?", 1977.

V- Accords ou conventions

NON