



Chimie théorique et modélisation



ECTS
120 crédits

Durée
2 ans



Structure de
formation
Faculté des
Sciences



Langue(s)
d'enseignement
Français

Parcours proposés

- › M1 - Chimie théorique et modélisation
- › M2 - Chimie théorique et modélisation

Présentation

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

Objectifs

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

Savoir faire et compétences

Compétences disciplinaires :

- * Définir et mettre en œuvre une stratégie de modélisation numérique à partir d'un problème expérimental en chimie, ou bien aux frontières avec la physique et la biochimie (M)
- * Exploiter et analyser les résultats issus de calculs basés sur les principales méthodes de la chimie théorique (E)
- * Développer des outils de modélisation et simulation, en particulier pour la chimie, grâce à la maîtrise d'outils informatiques, de diverses méthodes numériques, et d'au moins un langage de programmation (M)

Compétences transversales :

- * Participer à des réunions de travail en anglais
- * Concevoir, conduire et gérer un projet en autonomie
- * S'intégrer dans un milieu professionnel

Organisation

Stages, projets tutorés

Stage : Obligatoire

Projets tutorés en M1 et en M2

- * 1 stage obligatoire en M1, 2 mois minimum
- * 1 stage obligatoire en M2, 5 mois minimum

Admission



Conditions d'accès

Les candidatures se font sur les plateformes suivantes :

- * Étudiants français & Européens : suivre la procédure « Mon Master » depuis le site : <https://www.monmaster.gouv.fr/>
- * Pour les M2, l'étudiant.e devra déposer son dossier de candidature via l'application e-candidat du site web de la Faculté des sciences de l'Université de Montpellier.
- * Étudiants internationaux hors UE : suivre la procédure « Études en France » : <https://pastel.diplomatie.gouv.fr/etudesenfrance/dyn/public/authentication/login.html>

Public cible

Niveau(x) de recrutement : Bac + 3

Formation(s) requise(s) : les Licences conseillées pour être admis en Master 1 sont les Licences de Chimie-Physique, de Chimie ou de Sciences Physiques.

Pour l'entrée en directe en Master 2 :

Idéalement : Master mention Chimie ou mention Sciences Physiques et Chimiques 1ère année, avec une forte composante en chimie théorique et modélisation.

Dossiers examinés avec attention : une formation moins adaptée, mais complétée par des connaissances en modélisation (via la formation initiale ou bien sous forme de stage) et accompagnée d'une forte motivation.

Capacité d'accueil

5 en M1 et M2

Pré-requis nécessaires

Le parcours Chimie Théorique et Modélisation s'adresse en priorité aux étudiants titulaires d'une licence généraliste

mention Chimie-Physique ou Chimie. Les étudiants titulaires d'une licence généraliste en sciences peuvent se présenter par l'établissement d'un dossier de candidature.

Pré-requis recommandés

Être titulaire d'une Licence à dominante Chimie-Physique ou Chimie.

Et après

Poursuites d'études

Doctorat, le plus souvent dans le domaine de la modélisation en chimie (chimie quantique, modélisation et dynamique moléculaires ou solides, physico-chimie théorique, etc.). De nombreuses opportunités de poursuite en doctorat sont offertes en France mais aussi à l'étranger.

Poursuites d'études à l'étranger

Doctorat, le plus souvent dans le domaine de la modélisation en chimie (chimie quantique, modélisation et dynamique moléculaires ou solides, physico-chimie théorique, etc.).

Insertion professionnelle

Les diplômés s'insèrent dans le domaine de la modélisation et la simulation (ingénieur en études, recherche et développement, ingénieur Chimiste en modélisation moléculaire, etc.).

Autres métiers accessibles aux diplômés de ce parcours : Analyste programmeur, Développeur logiciel.



Infos pratiques

Contacts

Responsable pédagogique

Christophe RAYNAUD

✉ christophe.raynaud1@umontpellier.fr

Etablissement(s) partenaire(s)

Université Paul Sabatier Toulouse 3

Université de Bordeaux

Université de Pau et des Pays de l'Adour

Laboratoire(s) partenaire(s)

Institut Charles Gerhardt Montpellier (ICGM)

Laboratoire de Chimie et Physique Quantique
(Toulouse)

Laboratoire de Physique et Chimie des Nano-
objets (Toulouse)

Institut des Sciences Analytiques et de Physico-
Chimie pour l'Environnement et les Matériaux
(Pau)

Institut des Sciences Moléculaires (Bordeaux)

De façon générale l'ensemble des laboratoires
en lien avec le Réseau Français de Chimie
Théorique et la Fédération de Recherche
THEMOSIA (théories, modélisations et
simulations atomistiques).

Lieu(x)

📍 Montpellier - Triolet

En savoir plus

🔗 <https://master-chimie.edu.umontpellier.fr/>



Programme

Organisation

Ce parcours propose un enseignement en partie mutualisé dans le cadre du Réseau Français de Chimie Théorique (RFCT) avec des intervenants des différents centres universitaires du Pôle Sud-Ouest (Bordeaux, Montpellier, Pau et Toulouse).

M1 - Chimie théorique et modélisation

M1S1 CTM

Statistical Mechanics (UE Toulouse 3)	4 crédits
Quantum Mechanics I	4 crédits
Spectroscopie RMN liquide et diffraction de rayons X	2 crédits
CHOIX 1	2 crédits
Matériaux inorganiques avancés	2 crédits
Thermodynamique et équilibres de phases	2 crédits
Chimiométrie, analyse statistique des données, plan d'expé	2 crédits
Chimie organométallique et chimie des hétéro-éléments	2 crédits
Méthodologie de caractérisation des matériaux	2 crédits
CHOIX 2	2 crédits
Crystallography I	2 crédits
Chimie de coordination et chimie organique	2 crédits
Projets professionnels – suivi de projets	8 crédits

M1S2 CTM

Modélisation Moléculaire (UE Toulouse 3)	2 crédits
Stage 2-4 mois	10 crédits
Quantum Mechanics II	5 crédits
Matériaux à propriétés électroniques remarquables	4 crédits
Spectroscopie Théorique	3 crédits
Communication et insertion professionnelle	2 crédits
Propriétés électroniques et optiques	2 crédits
Chimie de coordination des éléments f	2 crédits

M2 - Chimie théorique et modélisation

M2S3 CTM

Management de projet - Droit de l'entreprise	4 crédits
Réactivité organométallique théorique	3 crédits
Modélisation et Réactivité	6 crédits
Méthodologie de la Chimie Quantique	3 crédits
Modélisation des matériaux à propriétés spécifiques	4 crédits
Méthodes numériques pour la chimie théorique	4 crédits
Anglais avancé	2 crédits
Simulations atomistiques	4 crédits

M2S4 CTM

Stage 5-6 mois	30 crédits
----------------	------------