



# MASTER 2 RECHERCHE CHIMIE

2016/2017

Secrétariat pédagogique  
Madame Marie-Claire Beaubelicoux  
Bâtiment 2A, RdC  
Tél : 05 61 55 60 74  
e-mail : [apca31@adm.ups-tlse.fr](mailto:apca31@adm.ups-tlse.fr)

## La Faculté des Sciences et Ingénierie

La Faculté des Sciences et Ingénierie (FSI) Sciences met en œuvre l'ensemble de la formation dans les domaines des sciences et de l'ingénierie et assure l'articulation avec les activités de recherche qui relèvent de son périmètre. Adossée à une soixantaine de laboratoires de recherche, la formation adresse les domaines suivants :

- Mathématiques
- Informatique
- Mécanique
- Physique
- Chimie
- EEA (Electronique-Electrotechnique-Automatique)
- Biologie-Géosciences

Ainsi que :

- Le département de Langues Vivantes et Gestion
- L'Upssitech (UPS sciences ingénierie et technologie), école interne accessible au niveau L2 et habilitée à délivrer le titre d'Ingénieur de l'Université de Toulouse.

Soucieuse d'un enseignement de qualité qui donne accès à un métier et répond aux exigences et besoins du monde du travail, la FSI propose des formations offrant de nombreux débouchés dans le secteur public comme dans le secteur privé.

Assurées par des enseignants du supérieur, également chercheurs dans des laboratoires de recherche de grande renommée nationale et internationale ainsi que par des intervenants extérieurs dont plusieurs centaines de salariés d'entreprises, ces formations donnent une large place aux TD et TP en petits groupes et aux stages en entreprise.

Les étudiants sont accompagnés dans la réussite de leurs études et leur insertion professionnelle par des équipes pédagogiques et administratives investies dans le soutien, le conseil et l'orientation.

Chaque année, plus de 8000 étudiants ont choisi la FSI pour préparer leur avenir professionnel.

## MASTER 2 RECHERCHE CHIMIE

2 spécialités Recherche :

### - Chimie Fondamentale et Appliquée

2 parcours :

- \* Nanoobjets : Conception et Innovation
- \* Synthèse et Applications

### - Chimie Théorique

2 parcours :

- \* Chimie Théorique et Modélisation
- \* Euromaster on Theoretical Chemistry and Computational Modelling

## PRESENTATION

Le Master de Chimie propose 3 spécialités : la Chimie Fondamentale et Appliquée, la Chimie Théorique et la Chimie analytique et instrumentation). En deuxième année, une des spécialités est proposée sous forme d'un master Pro (Chimie Analytique et Instrumentation) et les 2 autres comme Master recherche (Spécialité Chimie fondamentale et appliquée, co-habilitée avec l'ENSIACET/INP et Spécialité Chimie théorique).

Chacune des spécialités recherche offre 2 parcours :

- pour la spécialité Chimie Fondamentale Appliquée

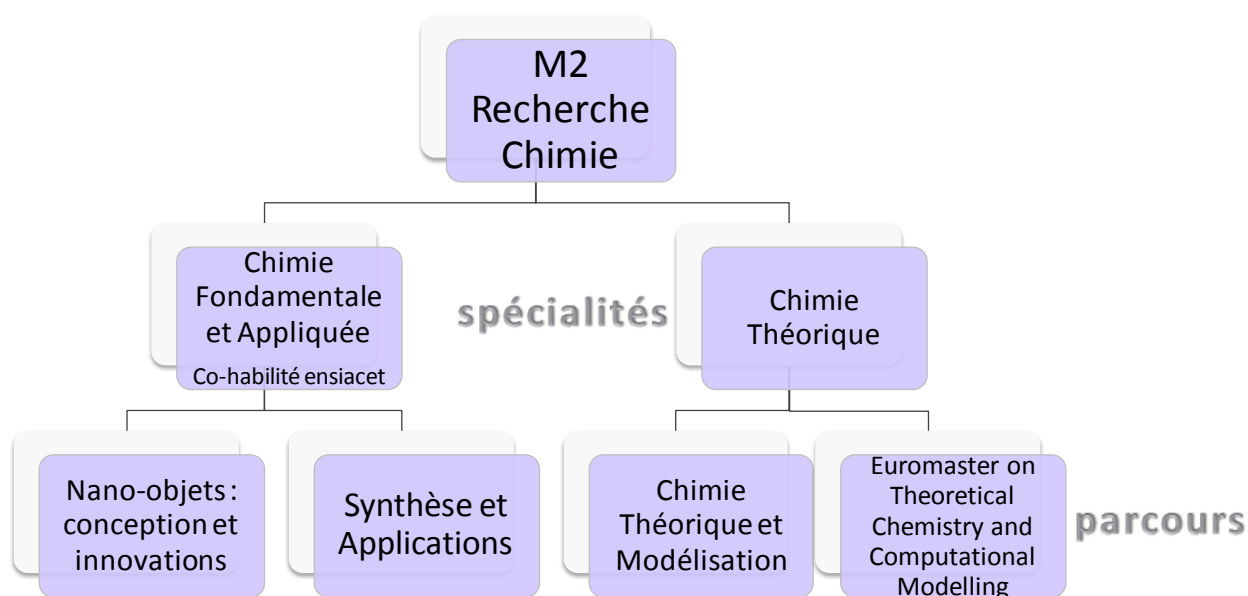
*Parcours : Synthèses et applications*

*Parcours : Nanoobjets, conception et innovation.*

- pour la spécialité Chimie Théorique :

*Parcours Chimie Théorique et Modélisation*

*Erasmus Mundus "Theoretical Chemistry and Computational Modelling"*



## RESPONSABLE DE LA FORMATION

Nancy de VIGUERIE, Professeur UPS, tél : 05 61 55 61 35, e-mail : [viguerie@chimie.ups-tlse.fr](mailto:viguerie@chimie.ups-tlse.fr)  
e-mail : [viguerie@chimie.ups-tlse.fr](mailto:viguerie@chimie.ups-tlse.fr)

## INSCRIPTION POUR L'ANNEE 2016-2017

L'admission des étudiants dans le M2 Recherche est de plein droit pour tous les titulaires d'un Master 1 de Chimie de l'UPS. Par contre, elle se fait sur dossier pour les étudiants titulaires d'une Maîtrise de Sciences Physiques et Chimiques, d'une Agrégation de Chimie, d'un Master 1 de Biochimie, d'un diplôme de Pharmacien, d'un diplôme d'IUP du domaine, d'un diplôme d'Ingénieur, que ces étudiants aient été diplômés ou non à l'UPS. C'est l'équipe de formation du master qui orientera l'étudiant en fonction de sa demande et de son parcours antérieur. Dans une trentaine de pays dont la France, une procédure dématérialisée de candidature en ligne a été mise en place. Elle doit être obligatoirement suivie pour l'obtention du visa "étudiant". Toutes les informations sont disponibles sur le site <http://www.campusfrance.org/>

- Vous êtes titulaire du M1 obtenu dans une Université française (y compris UPS) ou titulaire d'un diplôme étranger (or étudiants Campus France) ou étudiant d'une Grande Ecole ou Ecole Nationale Supérieure d'Ingénieurs, vous pouvez faire acte de candidature en M2 Chimie via le site de l'université : <https://appli-gestion.univ-tlse3.fr/syspo> en respectant le calendrier suivant :
  - pré-inscriptions du 4 mai au 8 juin 2016
  - transmission du dossier jusqu'au 13 juin 2016.
  - date de décision d'admission : 4 juillet 2016
  - 1<sup>ère</sup> confirmation : du 4 au 11 juillet 2016
  - 2<sup>ème</sup> confirmation : du 19 au 26 Aout 2016
- Pour les étudiants Campus France, consulter le site <http://www.campusfrance.org/> pour connaître la procédure exacte de dépôt de dossier.

## DEBOUCHES ET EMPLOIS ACCESSIBLES

- Doctorant
- Enseignant chercheur
- Chercheur
- Cadre technique d'études scientifiques et de recherche fondamentale
- Cadre technique d'études-recherche-développement de l'industrie
- Ingénieur-concepteur en recherche ou application
- Ingénieur de production
- Ingénieur technico-commercial
- Consultant
- Chef d'entreprise (start-up)

dans les secteurs d'activité de la chimie : Agroalimentaire, Pharmaceutique, Cosmétiques, Détergents, Matériaux, Chimie de base, Environnement, Energie...

## RESPONSABLES DES SPECIALITES ET PARCOURS

### Spécialité : Chimie Fondamentale et Appliquée (UPS, ENSIACET)

Nancy de VIGUERIE, Professeur UPS, tél : 05 61 55 61 35, e-mail : [viguerie@chimie.ups-tlse.fr](mailto:viguerie@chimie.ups-tlse.fr)

#### - *Parcours : Nanoobjets : conception et Innovation*

Jean-Daniel MARTY, Maître de conférences UPS, Laboratoire des Interactions Moléculaires Réactivité Chimique et Photochimique, UMR CNRS 5623, tél : 05 61 55 61 35, e-mail : [marty@chimie.ups-tlse.fr](mailto:marty@chimie.ups-tlse.fr)

- **Parcours : Synthèse et applications**

Montserrat Gómez, Professeur UPS, Laboratoire Hétérochimie Fondamentale et Appliquée, UMR CNRS 5069, Tel : 05 61 55 77 38, Fax : 05 61 55 82 04, e-mail : [gomez@chimie.ups-tlse.fr](mailto:gomez@chimie.ups-tlse.fr)

**Spécialité : Chimie Théorique**

Romuald Poteau, Professeur UPS, Laboratoire de Physique et Chimie des Nano-Objets (UMR5215, IRSAMC), Tel : 05 61 55 96 64, e-mail : [romuald.poteau@univ-tlse3.fr](mailto:romuald.poteau@univ-tlse3.fr)

- **Parcours : Chimie Théorique et Modélisation**

Romuald Poteau, Professeur UPS, Laboratoire de Physique et Chimie des Nano-Objets (UMR 5215, IRSAMC), Tel : 05 61 55 96 64, e-mail : [romuald.poteau@univ-tlse3.fr](mailto:romuald.poteau@univ-tlse3.fr)

- **Parcours : Euromaster on Theoretical Chemistry and Computational Modelling (Erasmus Mundus)**

Stéphano Evangelisti, Professeur UPS, Laboratoire de Chimie et Physique Quantique (UMR 5626, IRSAMC), Tel. 05 61 55 76 94, e-mail : [stefano.lcpq@gmail.com](mailto:stefano.lcpq@gmail.com)

## ORGANISATION DE LA FORMATION

Semestre 9			Semestre 10	
Tronc commun			Spécialité	
6 ECTS	3 ECTS	3 ECTS	2 UE de 3 ECTS 2UE de 6 ECTS	stage en laboratoire de recherche (5 mois) <b>27 ECTS</b> + anglais <b>3 ECTS</b>
Métier Chercheur	Métier enseignant ou Ouverture industrielle	Chimie et développement durable ou Evolution des propriétés électroniques : de la molécule à la nanoparticule	<b>18 ECTS</b>	
<b>Total 7 UE 30 ECTS</b>				

L'étudiant doit suivre 4 UE proposées dans le tronc commun dont le choix est restreint en fonction de la spécialité choisie, ainsi que 3UE de la spécialité choisie. Les étudiants de l'ENSIACET suivront un parcours identifié.

### Liste des unités d'enseignement de tronc commun (UE) proposées aux étudiants

UE1 : Métier Chercheur (code apogee : ER9CFAAM)

UE2 : Métier enseignant (code apogee : ER9CFABM)

UE3 : Ouverture industrielle (code apogee : ER9CFACM)

UE4 : Chimie et développement durable (code apogee : ER9CFADM)

UE5 : Evolution des propriétés électroniques : de la molécule à la nanoparticule (code apogee : ER9CFNAM)

UE6 : Chimie théorique : modélisation et réactivité (code apogee : ER9CFSAM)

## Liste des unités d'enseignement de spécialités (UE)

### *Parcours nano-objets, conception et innovation*

UE7 : Travaux pratiques de nanotechnologies (code apogee : ER9CFNBM)

UE8 : Nano-objets pour la catalyse et la nanomédecine (code apogee : ER9CFNDM)

UE9 : Caractérisation et contrôle de l'organisation des nano-objets (code apogee : ER9CFNCM)

### *Parcours synthèse et applications*

UE10 : Eléments des blocs p et d : applications en synthèse (code apogee : ER9CFSBM)

UE11 : Ingénierie moléculaire pour les applications de demain (code apogee : ER9CFSCM)

UE12 : Obtention, réactivité et applications en chimie fine des (macro)molécules d'origine naturelle (code apogee : ER9CFSDM)

### *Parcours chimie théorique et modélisation*

UE13 : Méthodologie de la chimie théorique (code apogee : ER9CHTCM)

UE14 : Module du Label Réseau Français de Chimie Théorique (code apogee : ER9CHTBM)

UE15 : Module à choix

## Parcours de l'étudiant

### - Spécialité Chimie Fondamentale et Appliquée

#### ***Parcours Nano-objets, conception et innovation***

UE de tronc commun : UE1 + 1UE à choix parmi UE2 & UE3 + UE4 + UE5

UE de spécialités : UE7 + UE8 + UE9

#### ***Parcours synthèse et applications***

UE de tronc commun : UE1 + 1UE à choix parmi UE2 & UE3 + UE4 + UE6

UE de spécialités : UE10 + UE11 + UE12

**Pour les étudiants de l'ENSIACET**, le parcours est le suivant : validation du projet de l'étudiant réalisé à l'ENSIACET (UE1) puis UE4, UE8, UE10 et UE12.

### - Spécialité Chimie Théorique

#### ***Parcours Chimie théorique et Modélisation***

UE de tronc commun : UE1 + 1UE à choix parmi UE2 & UE3 + UE5 + UE6

UE de spécialités : UE13 + UE14 + UE15

## Examens

Les examens se déroulent à la fin du semestre 9. Les stages débutent en janvier pour les étudiants de l'UPS et en mars pour les étudiants de l'ENSIACET et donnent lieu à une soutenance qui se tient fin juin (se reporter aux modalités de stage en fin de document). La deuxième session du S9 aura lieu fin juin-début juillet.

Semestre / UE	Matières et contenu des enseignements	Mots-clés et Objectifs
9 <sup>ème</sup> semestre UE1 ER9CFAAM	Métier Chercheur	Actualités de la recherche : Séminaires, conférences, cours thématiques. Elaboration et rédaction d'un projet de recherche
9 <sup>ème</sup> semestre UE2 ER9CFABM	Métier enseignant	Apprendre à construire et à exposer des séquences de cours et de TD de niveau L.
9 <sup>ème</sup> semestre UE3	Ouverture industrielle	Connaissance de l'entreprise et du secteur technico-commercial, techniques de communication, de management et de recherche d'emploi. Vie d'un projet de R&D dans l'industrie.
9 <sup>ème</sup> semestre UE4	Chimie et développement durable	Mots-clé : chimie verte / développement durable / environnement / santé Objectifs: (1) sensibiliser l'étudiant aux principes de chimie verte et à leurs finalités; (2) présenter les outils à disposition du chimiste pour rendre une transformation 'la plus verte' possible
9 <sup>ème</sup> semestre UE5	Evolution des propriétés électroniques : de la molécule unique à la nanoparticule	Transfert d'électron, machines et moteurs moléculaires, électronique moléculaire, nanoparticules, nanotubes de carbone
9 <sup>ème</sup> semestre UE6	Chimie théorique : modélisation et réactivité	Confrontation théorie-expérience dans le domaine de la chimie organométallique des éléments <i>d</i> et <i>f</i>
9 <sup>ème</sup> semestre UE7	Travaux pratiques de nanotechnologies	Mini-projet en nanochimie : synthèse, caractérisation et étude des propriétés de différentes familles de nano-objets
9 <sup>ème</sup> semestre UE8	Nano-objets pour la catalyse et la nanomédecine	Mots-clé : Nanoparticules, colloïdes, réactivité, imagerie, vectorisation Objectifs : montrer comment le chimiste peut, de façon raisonné, en visant une application donnée, synthétiser et modifier à façon des nanoobjets.
9 <sup>ème</sup> semestre UE9	Caractérisation et contrôle de l'organisation des nano-objets	Objectifs : (1) Approfondir la connaissance des techniques (microscopies, diffusion du rayonnement, magnétisme) pour la caractérisation de objets nanométriques (2) Organisation contrôlée de nanoobjets en 2D et 3D
9 <sup>ème</sup> semestre UE10	Eléments des blocs p et d : applications en synthèse	Hétéroéléments – Métaux de Transition – Chiralité et Transfert de Chiralité - Synthèse et Catalyse – Aménagement Fonctionnel – Activation de Liaisons – Interactions métal/substrat Originales - Hydrogène – Mécanismes réactionnels.  Etude de la contribution des hétéroéléments et des métaux de transition dans la mise au point de transformations efficaces et chémo- et stéréosélectives, selon des approches stœchiométriques et catalytiques.
9 <sup>ème</sup> semestre UE11	Ingénierie moléculaire pour les applications de demain	Chimie de coordination - Molécules pour propriétés physiques et transfert électronique - Conducteurs moléculaires - Aimants moléculaires - Bistables moléculaires - Conversion de l'énergie - cellules photovoltaïques - LEDs, OLEDs,  Etudier de façon approfondie l'influence des différents constituants d'un complexe de

		coordination (le métal et ses ligands), au niveau d'une molécule ou d'un assemblage moléculaire, pour des applications qui utilisent l'électron comme source de propriétés dans les domaines du stockage de l'information, de l'électronique moléculaire, des diodes électroluminescentes et du photovoltaïque. Illustration de l'utilisation des concepts récents de la chimie de coordination dans le développement d'applications innovantes et variées pour la vie quotidienne.
9 <sup>ème</sup> semestre UE12	Obtention, réactivité et applications en chimie fine des (macro)molécules d'origine naturelle	Réactivité et applications des biomonomères et polymères issus de la biomasse concepts et méthodes en synthèse énantiosélective de produits naturels (analyse rétrosynthétique, induction de chiralité, aldolisation asymétrique ...)
9 <sup>ème</sup> semestre UE13	Méthodologie de la chimie théorique	L'objectif est d'enseigner le formalisme sous-jacent des principales méthodes de la chimie quantique. A l'issue du cours, les étudiants seront en mesure d'effectuer des calculs avec les principaux logiciels utilisés dans le domaine et d'en interpréter, avec un point de vue critique, les résultats numériques.
9 <sup>ème</sup> semestre UE14	UE Label Réseau Français de Chimie théorique 1	En fonction des modules, l'objectif peut aussi bien être une découverte des principaux outils de la chimie théorique et computationnelle qu'un approfondissement des méthodes.
9 <sup>ème</sup> semestre UE15	Module thématique à la carte	Ce module thématique permettra de compléter la formation des étudiants intéressés par la chimie théorique.
10 <sup>ème</sup> semestre anglais		Acquérir l'autonomie linguistique
10 <sup>ème</sup> semestre	Stage	janvier-Juin <b>5 mois</b>
9 <sup>ème</sup> ou 10 <sup>ème</sup> semestre	Stage facultatif	Durée maximale 6 mois



## Semestre 9

Durée : 14 semaines

## TRONC COMMUN

ER9CFAAM

## UE1 - METIER CHERCHEUR

**Responsable** : Maryse GOUYGOU ✉ LCC – CNRS, composante ENSIACET, 4 allée Emile Monso 31030 Toulouse cedex 4 – France

Email : maryse.gouygou@lcc-toulouse.fr ☎ téléphone : 05 34 32 35 77

**Equipe pédagogique** : M. BART-GADAT, R. CHAUVIN, M. DESTARAC, M. GOUYGOU, C. NAYRAL, R. POTEAU, K. PHILIPPOT

ECTS	COURS	TD	TP
6	10		20

**Objectif :**

Elaboration et pilotage scientifique de projets de recherche, production scientifique, valorisation des résultats, diffusion de l'information scientifique et formation par la recherche, telles sont les principales missions du chercheur.

Ce module a pour objectif de faire découvrir à l'étudiant certains aspects du métier chercheur.

**Description :**

Cette UE est divisée en deux parties.

La première partie est consacrée à l'actualité de la recherche. Des séminaires, conférences et cours thématiques sont proposés pour donner à l'étudiant un aperçu des thématiques actuellement en pointe.

La deuxième partie portera sur la conception et la rédaction d'un projet en relation avec le sujet du stage de recherche. Des outils nécessaires à la réalisation de ce travail seront donnés aux cours d'une formation au montage d'un «projet de recherche » et d'une formation à la méthodologie de la recherche bibliographique. Pour l'élaboration de ce projet de recherche, qui comporte une part importante de travail personnel, l'étudiant bénéficiera d'un accompagnement assuré par un enseignant-chercheur.

**Modalités de contrôle des connaissances :**

**Session 1** : CC 30% et CT 70%

**Session 2** : CT 100% oral

**Responsable** : Michèle BROST ✉ Université Paul Sabatier - Agrégation de Chimie - Bât. 2A -  
F-31062 TOULOUSE CEDEX 9  
Email : [mbrost@cict.fr](mailto:mbrost@cict.fr) ☎ téléphone : 05 61 55 83 53

**Equipe pédagogique** : Michèle BROST ; Stefan CHASSAING ; Isabelle HALLERY

ECTS	COURS	TD	TP
3		18	

**Objectif** : apprendre à construire et à exposer des séquences de cours et de TD de niveau L.

**Description** : présentation d'enseignements de chimie de niveau L

**Ouvrages conseillés** : ouvrages de niveau L

**Modalités de contrôle des connaissances** :

**Session 1** : CC 50% (oral) CT 50% (oral)

**Session 2** : CT 100% (oral)

**Responsable** : Mathias DESTARAC, Laboratoire des IMRCP UMR-CNRS 5623, 118 route de  
Narbonne, 31062 Toulouse Cedex 9 TOULOUSE CEDEX 9  
Email : [destarac@chimie.ups-tlse.fr](mailto:destarac@chimie.ups-tlse.fr) ☎ téléphone : 05 61 55 63 54

**Equipe pédagogique** : Mathias DESTARAC, Dominique Ballot

ECTS	COURS	TD	TP
3	18		

**Objectifs** : Connaissance de l'entreprise et du secteur technico-commercial, techniques de communication, de management et de recherche d'emploi.

Vie d'un projet de R&D dans l'industrie : construction et conduite de projet, connaissance des marchés, autorisation de mise sur le marché, matières premières, évaluation des coûts matières premières et procédé, propriété industrielle, veille concurrentielle, aspects réglementaires. Illustration par des exemples concrets.

**Modalités de contrôle des connaissances** :

**Session 1** : CT 100% (écrit)

**Session 2** : CT 100% (oral)

**Responsable** : Stefan CHASSAING, ✉ Laboratoire de Synthèse & PhysicoChimie de Molécules d'Intérêt Biologique, 118 route de Narbonne, 31062 Toulouse Cedex 9  
E-mail : [chassaing@chimie.ups-tlse.fr](mailto:chassaing@chimie.ups-tlse.fr) ☎ téléphone 05 61 55 61 35

**Equipe pédagogique** : Florence BENOIT-MARQUIE, Stefan CHASSAING, Emmanuel FLAHAUT, Jean-Daniel MARTY, Philippe SERP, Nancy de VIGUERIE.

ECTS	COURS	TD	TP
3	18		



### Objectifs :

La chimie verte, ou chimie durable, est un domaine de la chimie qui regroupe un ensemble de principes dont l'application vise à réduire voire éliminer l'usage ou la production de substances dangereuses ou toxiques lors de la conception, la fabrication et l'utilisation de produits issus de l'industrie chimique. En effet, les demandes écologiques, sociétales et politiques actuelles encouragent fortement le développement d'applications industrielles utilisant des procédés et/ou fabricant des produits propres, renouvelables et sans danger pour l'environnement & la santé humaine.

Dans ce cadre, les objectifs du module 'CHIMIE & DEVELOPPEMENT DURABLE' sont: (1) de sensibiliser l'étudiant aux principes de chimie verte et à leurs finalités; (2) de présenter les outils à disposition du chimiste pour rendre une transformation 'la plus verte' possible. Cet enseignement s'inscrit dans la continuité des notions et concepts développés à la fois en M1 CHIMIE au cours du module 'CHIMIE & SOCIETE' et en 2ème année de l'ENSIACET au cours du module 'NOUVEAUX OUTILS POUR UNE CHIMIE DURABLE'.

Pour atteindre ces objectifs, l'enseignement va consister en trois parties successives:

#### A. PRINCIPES DE CHIMIE VERTE: RAPPELS

Cette partie introductive a pour but de rappeler rapidement les finalités de la chimie verte et apporter ainsi des réponses à la question '**Pourquoi** rendre une transformation ou un procédé chimique "vert"?'

#### B. OUTILS ACTUELS POUR UNE CHIMIE DURABLE: PRESENTATION & APPLICATIONS

Au cours de cette partie seront présentés les principaux outils de chimie verte actuellement à disposition du chimiste. Cette partie a donc pour but d'apporter des réponses à la question '**Comment** rendre une transformation ou un procédé chimique "vert"?'

Les outils seront présentés suivant la structure suivante:

**B1. REACTIFS/CATALYSEURS ALTERNATIFS:** oxydants non métalliques, carbonate de diméthyle, enzymes, catalyseurs organiques, catalyseurs hétérogènes (acides solides, résines échangeuses d'ions ...), réactifs/catalyseurs supportés ...

**B2. SOLVANTS/MILIEUX REACTIONNELS ALTERNATIFS:** sans solvant, eau, liquides ioniques, hydrocarbures perfluorés, fluides supercritiques ...

**B3. MODES D'ACTIVATION ALTERNATIFS:** micro-ondes, ultra-sons, photochimie, électrochimie

#### C. CHIMIE VERTE & INDUSTRIE CHIMIQUE

Cette partie servira de conclusion à cet enseignement et consistera en la présentation de quelques applications industrielles exploitant/combinant de manière judicieuse plusieurs des outils présentés dans la partie B).

**Mots-clé:** chimie verte / développement durable / environnement / santé humaine

**Ouvrages de référence :**

James Clark & Duncan Macquarrie, *Handbook of Green Chemistry & Technology* (Blackwell Publishing)

Pietro Tundo, Alvis Perosa & Fulvio Zecchini, *Methods & Reagents for Green Chemistry* (Wiley)

**Modalités de contrôle des connaissances :**

**Session 1 :** CC 30% (oral) CT 70% (écrit)

**Session 2 :** CT 100% (oral)

**ER9CFNAM**

## UE5 – EVOLUTION DES PROPRIETES ELECTRONIQUES : DE LA MOLECULE UNIQUE A LA NANOPARTICULE

**Responsable :** Gwénaél RAPENNE ✉ CEMES-CNRS, 29 rue Marvig - 31055 Toulouse Cedex 4 – France E-mail : [rapenne@cemes.fr](mailto:rapenne@cemes.fr) ☎ téléphone 05 62 25 78 41

ECTS	COURS	TD	TP
3	18		

**Equipe pédagogique :** Romuald POTEAU et Gwénaél RAPENNE

**Pré-requis :** Formation de base en chimie moléculaire niveau L3. Ouvert aux étudiants de M1 chimie, nanochimie et chimie théorique

**Objectifs :**

Cette UE est dédiée à la compréhension des propriétés électroniques et de transferts d'électrons au sein de nano-objets de quelques nanomètres (pour des molécules machines uniques) à quelques dizaines de nanomètres (pour les nanoparticules). Le but est de tirer partie de ces propriétés électroniques originales pour mettre au point des applications dans des domaines aussi variés que l'électronique moléculaires, les machines et les moteurs moléculaires, la catalyse, les marqueurs luminescents ou des composants magnétiques. Une particularité de cette UE mutualisée entre le parcours chimie théorique et nanochimie sera d'utiliser différentes approches théoriques et/ou expérimentales pour décrire les nano-objets considérés.

A l'issue de cet enseignement, l'étudiant saura faire le lien entre propriétés électroniques visées et conception de molécules cibles, mais aussi développer des stratégies permettant d'optimiser la propriété ciblée des nano-objets étudiés. L'étudiant aura aussi acquis une connaissance des résultats les plus marquants de la littérature scientifique récente dans ce domaine en croissance rapide.

**Programme :****1. Description du Transfert d'électrons**

Transfert d'électron intermoléculaire, modèles semi classique et modèle quantique,

Particularités des processus intramoléculaires, transferts d'électrons photoinduits

**2. Adressage mono-moléculaire**

Nanoélectrodes, nanojonctions, microscopies en champ proche comme source d'énergie ou d'électron

Applications en électronique moléculaire

Electronique moléculaire hybride : fil, interrupteur, diode, transistor

Electronique moléculaire intégrée : Portes logiques moléculaires,

**3. Machines et moteurs moléculaires**

Molécules technomimétiques, nanomachines biologiques (ATP synthase, flagelles, complexe actine-myosine) et hybrides. Applications en mécanique moléculaire (moteurs, hélices ...)

#### 4. Petites nanoparticules (NPs) organométalliques: structure électronique et stabilité

Règles de décompte électronique au-delà de la règle des 18e, saturation électronique  
Les NPs organométalliques: des espèces réactives - électroniquement insaturées

#### 5. Les nanotubes de carbone

Un exemple 1D, densité d'états et généralisation aux systèmes 2D & 3D  
Nanotubes de carbone métalliques, semi-conducteurs, dopés et chimie à leur surface

#### 6. Mieux comprendre la structure électronique de grosses NPs: solides et surfaces

Des OM aux fonctions de Bloch, notion de bande d'énergie  
les surfaces solides comme modèles de la chimie de surface de NPs  
NPs organométalliques. Où sont les électrons ? Y a-t-il des liaisons ?

#### Ouvrages conseillés :

Electron transfer in Chemistry vol 5, V. Balzani, Wiley-VCH (2001)  
Electrons in molecules, J.-P. Launay, M. Verdaguer, Oxford University Press (2012)  
Molecular devices and machines, V. Balzani, A. Credi, M. Venturi, 2<sup>nd</sup> ed. Wiley-VCH (2008)  
Solids and surfaces : a chemist's view of bonding in extended structures, R. Hoffman, Wiley-VCH (2009) extraits dans R. Hoffman, « How Chemistry and Physics Meet in the Solid State », *Angew. Chem. Int. Ed.* 26 (1987) 846-878.  
Nanoparticles. From theory to application, G. Schmid, Wiley-VCH (2004)  
Science of fullerene and carbon nanotubes, M. S. and G. Dresselhaus, London Academic Press (1996)

#### Modalités de contrôle des connaissances :

Session 1 : CT 100% (écrit)

Session 2 : CT 100% (oral)

**ER9CFSAM**

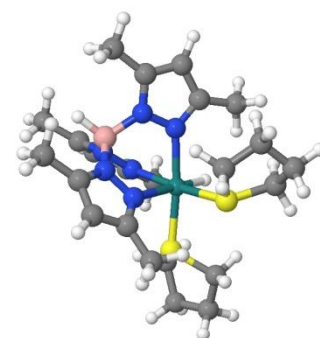
### UE6 – CHIMIE THEORIQUE : MODELISATION ET REACTIVITE

**Responsable :** Laurent MARON ✉ LPCNO-IRSAMC-UPS/INSAT, 135 avenue de Ranguueil, 31077 Toulouse Cedex, Bat DGP, porte 133 E-mail : laurent.maron@irsamc.ups-tlse.fr  
☎ téléphone : 05 61 55 96 64

ECTS	COURS	TD	TP
3	18		

#### Objectif :

Ce module constitue une confrontation théorie-expérience dans le domaine de la chimie organométallique des éléments *d* et *f*. L'étudiant saura faire le lien entre propriétés électroniques, mécanismes réactionnels multi-étapes et observations expérimentales. Il aura en outre une connaissance des principales méthodes de chimie quantique qui permettent une description de la structure électronique de complexes de métaux *d* et *f*, ainsi que de leur limitation.



#### Programme :

- Méthodes théoriques pour le traitement de la réactivité
  - Théorie de la fonctionnelle de la densité : principes
  - Méthodes d'analyse de la densité électronique : NBO, Bader
  - Techniques de pseudopotentiels : principes et exemples
  - Détermination de profils réactionnels, ainsi que des grandeurs thermodynamiques et cinétiques de réactions
- Réactivité des complexes de métaux de transitions

- Rappels sur les classes de ligands, le décompte électronique
- Les grandes classes de réactions : addition oxydante, élimination réductrice, insertion, métathèse
- Etude mécanistique de quelques grandes réactions (profils énergétiques et confrontation théorie-expérience) : réaction de polymérisation de type Ziegler-Natta, réactions de Murai
- Etude théorique de cycles catalytiques : réactions de fonctionnalisation des oléfines
- Réactivité des complexes de métaux f
  - Les particularités des lanthanides : comparaison groupe III/lanthanide
  - Etude de réactions d'activation de liaisons inertes : activations C-H, Si-H et C-F
  - Etude d'un cycle catalytique : l'hydrométhylation du propène (comparaison Sc/Lu)
  - La chimie des actinides : rôle des orbitales f (comparaison groupe III/lanthanide/actinide)
  - Etude de réactions d'activation et d'insertion

**Modalités de contrôle des connaissances :****Session 1** : CT 100% (écrit)**Session 2** : CT 100% (oral)

# SPECIALITÉ CHIMIE FONDAMENTALE ET APPLIQUÉE UPS-INPT/ENSIACET

## *Parcours nano-objets, conception et innovation*

**Responsable : J.-D. MARTY**

✉ Laboratoire des IMRCP UMR CNRS 5623

☎ +33 (0)5 61 55 61 35

✉ marty@chimie.ups-tlse.fr

**Objectif :** Le chimiste a de tout temps manipulé la matière à l'échelle nanométrique, mais les progrès technologiques dans la caractérisation à cette échelle, et la maîtrise accrue des processus de synthèse l'autorisent aujourd'hui à façonner des matériaux artificiels en contrôlant aussi bien leurs dimensions que leur forme, leur organisation que leurs fonctions. La spécialité a pour objectif de former les étudiants à l'élaboration et la caractérisation d'objets de taille nanométrique pour leurs applications dans des domaines aussi variés que la nanomédecine (imagerie, vectorisation), la catalyse ou le stockage de l'information.

**Débouchés :** Inscription en thèse. Débouchés professionnels dans les centres de R&D industriels dans le domaine de la pharmacie, des nanotechnologies, de l'analyse des systèmes nanométriques....

**Mots-clés :** Nanoobjets, colloïdes, matériaux nanostructurés, vectorisation, catalyse, imagerie, électronique moléculaire, stockage de l'information

**ER9CFNBM**

## **UE7 – TRAVAUX PRATIQUES DE NANOTECHNOLOGIES**

**Responsable :** Céline NAYRAL ✉ LPCNO-IRSAMC-UPS/INSAT, 135 avenue de Rangueil,  
31077 Toulouse Cedex, Bat DGP, porte 133

E-mail : cnayral@insa-toulouse ☎ téléphone : 05 61 55 96 50

ECTS	COURS	TD	TP
3			30

**Equipe pédagogique :** C. AMIENS, D. CIUCULESCU, N. de VIGUERIE, J.-D. MARTY, C. TARDIN, C.NAYRAL

**Pré-requis :** Etre titulaire d'un Master 1, en chimie ou matériaux

**Objectif :** L'objectif de cette UE est de permettre aux étudiants de se familiariser avec les différents aspects pratiques de la nanochimie. Cet apprentissage s'appuiera sur la synthèse, la caractérisation et l'étude des propriétés de différentes familles de nano-objets.

**Programme** : Ces TP sont conçus afin de mettre en perspective le caractère pluridisciplinaire de l'étude des nano-objets : physique, chimie, biologie, matériaux. Chaque TP sera mené comme un mini-projet (recherche bibliographique, évaluation des coûts, plans d'expérimentation, expérience) qui sera exposé devant l'ensemble des étudiants. Chaque étudiant choisira un TP adapté à son projet professionnel, parmi la liste suivante :

- Nanoparticules d'argent : synthèse des particules (contrôle des morphologies et de la croissance, caractérisation par microscopie électronique) suivie de l'étude de leurs propriétés :
  - axe 1 : vers la biologie en tant que marqueurs de la mobilité membranaire.
  - axe 2 : vers la physique et l'étude de leurs propriétés optiques (plasmonique).
  - axe 3 : vers la physico-chimie (transfert de phase et greffage de polymères).
- Copolymères thermosensibles : synthèse de polymères de différentes compositions, caractérisation par RMN, DLS,...
- Matériaux nanostructurés répondant à un stimulus extérieur : muscles artificiels.
- Plaquettes d'oxyde de tungstène pour une application capteur de gaz : synthèse du matériau sensible, dépôt organisé sur substrat et mesures sous gaz.

**Ouvrages conseillés** : Les Nanosciences, Tome 1 et 2, Dunod

**Modalités de contrôle des connaissances** :

**Session 1** :

CC1 70% : présentation orale du projet puis des résultats de TP  
CC2 30% pratique (qualités d'expérimentateur)

**Session 2** :

CC2 report 30%  
CT 70% oral

**ER9CFNDM**

## UE8 – NANO-OBJETS, APPLICATIONS EN CATALYSE ET NANOMEDECINE

**Responsable** : Jean-Daniel MARTY ✉ IMRCP, Bat 2R1, UMR CNRS 5623  
Université Paul Sabatier 31062 Toulouse Cedex 09 E-mail : [marty@chimie.ups-tlse.fr](mailto:marty@chimie.ups-tlse.fr),  
☎ téléphone : 05 61 55 61 35

ECTS	COURS	TD	TP
3	33		

**Equipe pédagogique** : Diana CIUCULESCU-PRADINES, Katia FAJERWERG, Anne-Françoise MINGOTAUD, Christophe MINGOTAUD, Jean-Daniel MARTY, Céline NAYRAL, Karine PHILIPPOT

**Pré-requis** : Connaissance de bases sur les nanoparticules, les polymères et les systèmes organisés.

**Objectif** : Cette UE a pour objectif de montrer comment le chimiste peut, de façon raisonné, en visant une application donnée, synthétiser et modifier à façon des nanobjets.



**Programme** : De part leurs propriétés innovantes, les applications des nanoobjets sont de plus en plus nombreuses dans tous les domaines des sciences (chimie, biologie, physique, ...). Le contrôle de ces propriétés passe en particulier par une maîtrise de leurs conditions d'élaboration et de leur caractérisation. Cette UE a pour objectif de montrer comment le chimiste peut de façon raisonnée, en visant une application donnée, synthétiser et modifier à façon ces nanoobjets.

### **Partie 1. Elaboration des nanoobjets :**

- Nanoobjets inorganiques : nucléation, croissance, contrôle de l'anisotropie
- Polymères à architectures complexes : polymères diblocs et triblocs, micelles de polymères, polymères hyperramifiés et dendrimères, nanocapsules et nanosphères.
- Nouveaux outils pour l'élaboration de nano-objets (microfluidique, ...)

**Partie 2. Outils d'analyse des nanoobjets** : le but de cette partie est de présenter les différents outils à disposition pour l'étude de la morphologie des nanoparticules et de leur interaction avec les molécules les entourant.

- Taille et morphologie : microscopies (électroniques), diffusion du rayonnement (DLS, SAXS, SANS)
- Propriétés optiques : UV-visible, fluorescence
- Interaction avec des ligands : méthodes thermiques
- Propriétés magnétiques : SQUID, ...

### **Partie 3. Applications des nanoobjets**

- Application dans les systèmes vivants : imagerie et vectorisation
- Réactivité

**Mots-clés** : Nanoparticules, colloïdes, réactivité, imagerie, vectorisation

**Modalités de contrôle des connaissances** :

**Session 1** : CT 100% (écrit)

**Session 2** : CT 100% (oral)

**ER9CFNDM**

## **UE9 – CARACTERISATION ET CONTROLE DE L'ORGANISATION DES NANO-OBJETS**

**Responsable** : Catherine AMIENS ✉ Laboratoire de Chimie de Coordination du CNRS, 205 route de Narbonne, 31077 Toulouse Cedex 04 📧 [Catherine.Amiens@lcc-toulouse.fr](mailto:Catherine.Amiens@lcc-toulouse.fr) ☎  
téléphone : 05 61 33 31 82

ECTS	COURS	TD	TP
3	33		

**Equipe pédagogique** : C. AMIENS, N. LAUTH-DE VIGUERIE, J.-D. MARTY, M. KAHN, K. FAJERWERG

**Pré-requis** : Connaissances de base sur les nanoparticules, les polymères et les systèmes organisés.

**Objectif** : Acquérir les outils permettant de contrôler la structure de nano-objets hybrides et leurs propriétés d'organisation en 2D et 3D ; deux points qui constituent un enjeu majeur pour leurs applications dans de nombreux domaines.

**Programme** : Les différentes stratégies mises en œuvre pour induire des organisations 2-D et 3-D de nano-objets à l'échelle nanométrique en solution, au sein de matériaux ou sur surface seront présentées.

- 1) Dispersion, stabilité colloïdale, nucléation/croissance. Concepts généraux (notions communes à l'UE8)
- 2) Nouveaux systèmes colloïdaux organiques polyfonctionnels:
  - Systèmes répondants à des stimuli externes (T, pH, ...)
  - Systèmes pour la reconnaissance moléculaire
  - Nanoparticules de Janus.
- 3) Systèmes organisés en trois dimensions :
  - Principes généraux sur l'auto-organisation, mise en évidence par RMN
  - Systèmes organisés en solution. Assemblages supramoléculaires complexes (vésicules multi lamellaires, onions, émulsions (Pickering, ...), microémulsions, structures lyotropes, utilisation pour la synthèse de nanoobjets (billes de polymères, nanoparticules inorganiques, NPs de type Janus) ou de matériaux mésoporeux.
  - Matériaux hybrides nanostructurés : systèmes cristaux liquides, polymères nanostructurés.
- 4) Matériaux organisés en surface :
  - Méthodes de caractérisation d'une surface (angles de contact, AFM, XPS, IRRAS...), modification de surface,.
  - Méthodes physiques et chimiques conduisant à l'organisation.
  - Applications au développement de capteurs.

**Ouvrages conseillés :**

- Principe d'analyse expérimentale, Skoog-Haller-Nieman, Ed. de Boeck, 2003 (2-7445-0112-3) ; 978-3-540-88633
- Les nanosciences.1. Nanotechnologies et nanophysique, C. Dupas, P. Houdy, M. Lahmani, Belin, Coll. Echelles, 2009 (ISBN 978-2-7011-5347-6)
- Les nanosciences.2. Nanomatériaux et nanochimie, M. Lahmani, C. Bréchnignac, P. Houdy, Belin, Coll. Echelles, 2006 (ISBN 978-2-7011-3831-2)

**Mots-clés** : microscopies, diffusion et absorption du rayonnement, nano-objets hybrides, organisation, capteurs

**Modalités de contrôle des connaissances :**

**Session 1** : CT 100% (écrit)

**Session 2** : CT 100% (oral)

## Parcours synthèse et applications

**Responsable : Montserrat GOMEZ**

✉ Laboratoire Hétérochimie Fondamentale et Appliquée, UMR CNRS 5069

☎ 05 61 55 77 38

✉ gomez@chimie.ups-tlse.fr

**Objectif :** Cette formation a pour objectif de former les étudiants par la recherche à la synthèse chimique de nouvelles molécules, en tenant compte des évolutions (catalyse organométallique, synthèses stéréosélectives, hétéroéléments...), pour proposer des applications comme les médicaments, l'électronique moléculaire, les matériaux moléculaires, les catalyseurs ...

La chimie moléculaire englobe les domaines de la chimie organique et inorganique.

**Débouchés :** Inscription en thèse. Débouchés professionnels dans les centres R&D industriels dans les domaines de la chimie, de la pharmacie ou de l'agrochimie. Chercheur ou enseignant-chercheur après une thèse de doctorat.

**Mots-clés :** Hétéroéléments, chimie organométallique, synthèses stéréo-sélectives, catalyse, énergie, électronique moléculaire, matériaux moléculaires.

ER9CFSBM

### UE10 – ELEMENTS DES BLOCS P ET D : APPLICATIONS EN SYNTHÈSE

**Responsable :** Pr. Blanca MARTIN VACA, ✉ Laboratoire Hétérochimie Fondamentale et Appliquée, 118 route de Narbonne, 31062 Toulouse Cedex 9 ✉ [bmv@chimie.ups-tlse.fr](mailto:bmv@chimie.ups-tlse.fr)  
☎ téléphone : 05 61 55 77 37

ECTS	COURS	TD	TP
6	45		

**Equipe pédagogique :** G. BOUHADIR, R. CHAUVIN, M. ETIENNE, M. GOMEZ, B. MARTIN-VACA, S. SABO-ETIENNE, P. SERP

**Pré-requis :** Bonne connaissance de la chimie organique et organométallique au niveau M1

#### Objectif

Ce module est consacré à l'étude approfondie de la chimie des hétéroéléments et des métaux de transition, et au rôle primordial qu'ils jouent en synthèse et en réactivité. La première partie du programme sera dédiée aux principales propriétés des hétéroéléments non-classiques (B, Si, P, S ...), où l'accent sera mis sur leur utilisation en synthèse et leur implication en chimie organométallique et en catalyse. La deuxième partie sera focalisée sur les concepts les plus récents en chimie organométallique : design de nouveaux ligands – H<sub>2</sub> et énergie hydrofonctionalisation – polymérisation – grands procédés industriels. Les mécanismes des réactions catalytiques seront particulièrement analysés. Une troisième partie aura comme finalité la synthèse stéréosélective et la catalyse asymétrique. Les différentes sources de chiralité et les contributions récentes concernant l'induction asymétrique avec les métaux de transition seront détaillées.

## Programme

### **Partie 1 : Application des hétéroéléments non-classiques (B, Si, P, S)**

- I. Propriétés des hétéroéléments.** Description des principales propriétés physicochimiques des hétéroéléments non-classiques. Influence de ces propriétés sur la structure et la réactivité de leurs composés. Principales méthodes de synthèse.
- II. Hétéroéléments et fonctionnalisation.** Organoboranes, vinyl- et aryl-silanes, phosphines et sulfoxydes en synthèse organique
- III. Copules chirales et création de liaison C-C.** Sulfoxydes et sulfones comme copules chirales. Ethers d'énol silylés et énolates de bore. Les dithioacétals. Chimie radicalaire du soufre.
- IV. Hétéroéléments et création de liaisons C=C.** Hétéroéléments et stabilisation de carbanions en  $\square$ . Carbanions du phosphore : réaction de Wittig, stéréochimie et variantes. Carbanions silylés : réaction de Peterson. Carbanions du soufre : réaction de Corey-Chaykovsky. Carbanions borés.
- V. Interface hétéroéléments-métaux de transition.** Ligands P- S- et B- donneurs. Hétérocycles phosphorés et borés. Réactions d'hydrofonctionnalisation. Réactions de couplage C-C (Suzuki, Hyama) et C-X.

### **Partie 2 : Chimie organométallique moderne**

#### **I. Concepts, mécanismes et nouvelles réactions catalytiques.**

- L'hydrogène comme carburant du futur ? Hydrures métalliques, déshydrogénation d'ammonia borane, paires de Lewis frustrées...
- Chimie des complexes « sigma » E-H (E = H, C, B, Si). Activation C-H et activation catalytique des alcanes (métathèse, déshydrogénation, borylation, chimie organométallique de surface).
- Alcènes et applications : polymérisation stéréospécifique et métathèse d'alcènes. Complexes de métaux du groupe 4 de différentes symétries, complexes alkylidène de molybdène et ruthénium, etc. Activation, interaction catalyseur / substrat, interactions secondaires, contrôle de la stéréochimie, apport de la chimie théorique.

#### **II. Evolutions récentes de systèmes catalytiques homogènes dans les grands procédés industriels.**

Mise au point d'un système catalytique performant au niveau industriel / performances du catalyseur en terme d'activité et de sélectivité / problèmes de stabilité, séparation, coût... Exemples de grands procédés industriels de la catalyse homogène : carbonylation du méthanol, synthèse "oxo" , hydrocyanation du butadiène...

### **Partie 3 : Synthèse et catalyse stéréosélectives : concepts et exemples**

- I. Principes de stéréochimie moderne.** Enjeux scientifiques et sociétaux. Analyse stéréochimique. Synthèse asymétrique : stratégies générales (dédoublings, synthèse et catalyse asymétriques : fond chiral ; auxiliaire, réactif ou catalyseur chiral)
- II. Complexes chiraux de métaux de transition.** Synthèse et réactivité stœchiométrique. Complexes à chiralité centrale (Fe, Re). Complexes à chiralité planaire (arènechrometricarbonyles, ferrocènes)
- III. La catalyse asymétrique.** Principes généraux: catalyses enzymatique, organique et organométallique. Oxydation asymétrique : métaux des groupes 4-7 (époxydation, dihydroxylation). Réduction asymétrique : métaux des groupes 8-9 (hydrogénation, transfert d'hydrogène, hydroformylation). Formation de liaison carbone-carbone asymétrique: métaux des groupes 10-11 (allylation, cyclopropanation)
- IV. Effets non linéaires et autocatalyse asymétriques.** Principes généraux : analyse cinétique et thermodynamique. Effets non linéaires. Autoréplication de la chiralité : modèle de Bailey. Autoinduction asymétrique catalytique : de Wynberg à Soai. Autocatalyse asymétrique. Origines de la biochiralité: modèle de Franck et scénarios chimiques.

### **Modalités de contrôle des connaissances :**

**Session 1 :** CT 100% (écrit)

**Session 2 :** CT 100% (oral)

**Responsable** : H. GORNITZKA, ✉ Laboratoire de Chimie de Coordination du CNRS, 205 route de Narbonne, 31077 Toulouse Cedex 04 📧 [gornitzka@lcc-toulouse.fr](mailto:gornitzka@lcc-toulouse.fr)  
☎ téléphone : 05 61 33 31 61

ECTS	COURS	TD	TP
6	33		

**Equipe pédagogique** : J. BONVOISIN, A. BOUSSEKSOU, H. GORNITZKA, I. MALFANT, G. RAPENNE, P. SUTRA

**Pré-requis** : Bonne connaissance de la chimie au niveau M1

### Objectif :

Cette UE s'articule autour de la chimie de coordination. Les objectifs sont d'étudier de façon approfondie l'influence des différents constituants d'un complexe de coordination (le métal et ses ligands), au niveau d'une molécule ou d'un assemblage moléculaire, pour des applications qui utilisent l'électron comme source de propriétés dans les domaines du stockage de l'information, de l'électronique moléculaire, des diodes électroluminescentes et du photovoltaïque. Cet enseignement est aussi une illustration de l'utilisation des concepts récents de la chimie de coordination dans le développement d'applications innovantes et variées pour la vie quotidienne.

A l'issue de cet enseignement, l'étudiant aura acquis les compétences pour concevoir des systèmes moléculaires avec des propriétés physiques ciblées, simples ou complexes. Cet UE fournira également à l'étudiant les outils pour analyser la problématique des applications du futur autour des propriétés physiques et d'envisager des pistes de recherche.

### Programme :

#### I. Introduction

#### II. Molécules pour propriétés physiques et transfert électronique

1. **Introduction avec notion des bases** pour les propriétés physiques cibles  
Ingénierie, matériaux et propriétés physiques
2. **Conducteurs moléculaires**  
Supraconductivité (organique et métal organique), évacuation des charges, métaux moléculaires
3. **Aimants moléculaires**  
Introduction au magnétisme moléculaire ; élaboration rationnelle d'édifices magnétiques : aimants et aimants de basses dimensionnalités (SMM et SCM), superparamagnétisme ; ...
4. **Bistables moléculaires**  
Champ cristallin et diagramme de configuration, mécanisme de la de la bistabilité, interactions élastiques, commutations électroniques induites par la lumière, la température, le champ magnétique, la pression ; corrélation bistabilité dimensionnalité et fluctuation magnétiques ; magnétisme photo induit ; ....
5. **Multifonctionnalité et couplage des propriétés**

Matériaux moléculaires multifonctionnels

Couplages des propriétés : magnétisme et conductivité/transition de spin/optique

6. **Transfert électronique intermoléculaire**

Mécanisme ; énergie d'activation : réorganisation interne / externe

Vitesse du transfert électronique : modèles semi classique (transfert adiabatique/non adiabatique) et quantique (effet tunnel nucléaire)

7. **Transfert électronique intramoléculaire et composés à valence mixte**

Transfert thermique et optique ; classification - Localisation/délocalisation –

Transition intervalence – couplage  $V_{ab}$  - Etudes expérimentales

8. **Transfert électronique photoinduit**

Réactivité chimique de l'état excité : transfert d'électron vers ou à partir de l'état excité

Processus de désactivation et Mécanismes de piégeage -propriétés rédox de l'état excité

Un archétype :  $[Ru(bipy)_3]^{2+}$

Transfert d'énergie: Mécanisme de double échange et mécanisme d'interaction coulombique

Spécificités des complexes d'intérêt photophysique (Os, Ir, Au, Cu, Pt, Cr, Lanthanides)

### III. Applications

1. Propriétés physiques

Electronique moléculaire

Mémoires, capteurs, portes logiques moléculaires, exemples de composants moléculaires : fil, interrupteur, diode, transistor, moteurs, antennes moléculaires

2. Transfert électronique

Antennes moléculaires, capteurs

Complexes hétéropolynucléaires, Complexes de lanthanides

L'état excité : un outil pour la synthèse

Photosynthèse assistée par les métaux à l'état excité, photodécomposition (dépollution) photo-production de l'hydrogène

Stockage chimique de l'énergie lumineuse

Photosynthèse artificielle, photolyse de l'eau

3. Conversion de l'énergie

Conversion de l'énergie solaire en énergie électrique : cellules photovoltaïques organiques et de type Graetzel (synthèse de complexes photosensibles, cocktails moléculaires, transferts d'électrons multiples avec les constituants de la cellule photovoltaïque : électrodes, électrolyte liquide ou polymère, ...).

Conversion de l'énergie électrique en énergie lumineuse. Diodes électroluminescentes (LEDs, OLEDs), complexes d'iridium, d'osmium et de cuivre, dispositifs innovants (éclairages intégrés, écrans ultra-plats, écrans flexibles, etc...).

### Modalités de contrôle des connaissances :

**Session 1** : CT 100% (écrit)

**Session 2** : CT 100% (oral)

## UE12 – Obtention, réactivité et applications en chimie fine des (macro)molécules d'origine naturelle

**Responsable** : Pascale DE CARO ✉ Laboratoire de Chimie Agro-industrielle, ENSIACET-LCA, 4 allée Emile Monso, BP 44362 – 31030 Toulouse Cedex 4 📧 pascale.decaro@ensiacet.fr  
☎ téléphone : 05 34 32 35 05

ECTS	COURS	TD	TP
3	18		

**Equipe pédagogique** : Michel DELMAS et Yves GENISSON

**Pré-requis** : Formation en Chimie organique niveau M1

**Objectif** : Les principales molécules du vivant : sucres, polysaccharides, acides aminés, protéines, lipides, monomères phénoliques, sont souvent modifiées chimiquement afin de bâtir de nouvelles molécules ou de changer leur propriétés fonctionnelles. Ce sont les matières premières des industries pharmaceutiques, cosmétiques et plus généralement des industries de la chimie fine. Ce module rappelle brièvement la structure de ces molécules et aborde leur réactivité chimique en termes de polyfonctionnalité. Des exemples de mise en œuvre de cette réactivité et des applications sont également donnés.

**Programme** : Le XXème siècle fut en chimie organique celui du pétrole. Le XXIème siècle sera celui de la biomasse non- alimentaire donc de la lignocellulose. Nous montrerons comment le raffinage de la lignocellulose, préservant l'intégrité de ses trois composants essentiels : la cellulose, la lignine et les hémicelluloses, met à la disposition de l'industrie chimique et pharmaceutique au sens large, après biotransformation ou transformation chimique, les synthons principaux de la chimie organique industrielle. La réactivité de ces biomonomères et biopolymères : sucres, polysaccharides, lignines et monomères phénoliques sera étudiée dans ses aspects conceptuels et applicatifs. Ils seront à brève échéance une part essentielle de la chimie organique en général et de la chimie fine en particulier avec les molécules associées dans la plante issus de métabolismes secondaires.

Par ailleurs, le monde végétal offre au chimiste de synthèse une source de molécules riches en termes de diversité structurale et d'information stéréochimique qui, depuis près de deux siècles, inspirent l'imagination et la créativité du chimiste organicien. Formant un grand réservoir de structures naturelles abondantes, appelé « fond chiral », il y a tout d'abord les terpènes, les sucres, les amino- et hydroxy acides. Nous détaillerons les stratégies de mise en valeur de ces grandes familles de dérivés dans le contexte de la synthèse multi-étapes de composés à visées biologiques. Puis, nous illustrerons les outils modernes de synthèse organique dans le cadre de l'hémisynthèse d'analogues de composés naturels, basée sur l'exploitation de métabolites secondaires rares et complexes. Des exemples issus du développement de grands médicaments anticancéreux tel que ceux issus de la famille des taxoïdes ou des alcaloïdes de la pervenche seront abordés.

**Ouvrages conseillés** : Chimie Organique par J. Clayden, N. Greeves, S. Warren et P. Wothers aux éditions De Boeck.

**Modalités de contrôle des connaissances** :

**Session 1** : CT 100% (écrit)

**Session 2** : CT 100% (oral)

# SPECIALITÉ CHIMIE THEORIQUE

## *Parcours chimie théorique et modélisation*

**Responsable : Romuald POTEAU**

✉ LPCNO-IRSAMC-UPS/INSAT, 135 avenue de Rangueil, 31077 Toulouse Cedex, Bat DGP, porte 133 ☎ 05 61 55 96 64 💻 Romuald.Poteau@univ-tlse3.fr

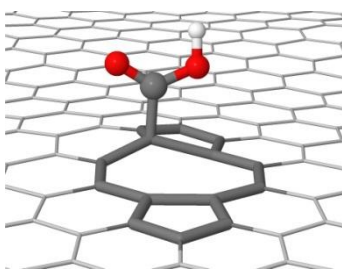
**Coordinateur Pôle Sud-Ouest du Réseau Français de Chimie Théorique : Romuald POTEAU**

### Objectif

Le but de la spécialité Chimie Physique et Théorique est de donner aux étudiants une formation rigoureuse dans l'étude théorique de la structure et de la dynamique des systèmes chimiques et physico-chimiques. Il s'agit de donner une vision large de la discipline permettant une spécialisation rapide en début de thèse.

Cette spécialité permettra aux étudiants d'obtenir le M2 avec le **Label Français de Chimie Théorique** (<http://www.chimietheorique.org>).

Ce label, créé à la rentrée 2006, est reconnu au niveau national par toutes les équipes de recherche relevant de la discipline.



*Les enseignements du Label couvriront divers aspects de la physico-chimie théorique se répartissant dans quatre thématiques principales :*

- *Molécule isolée*
- *Solide*
- *Simulation des systèmes complexes*
- *Approche quantique des mouvements des noyaux*

**ER9CHTCM**

## UE13 – METHODOLOGIE DE LA CHIMIE THEORIQUE

**Responsable** : Marie-Catherine HEITZ ✉ LCPQ-IRSAMC, UPS, 118 route de Narbonne, 31062 Toulouse Cedex, Bat 3R1 💻 heitz@irsamc.ups-tlse.fr ☎ téléphone : 05 61 55 76 26

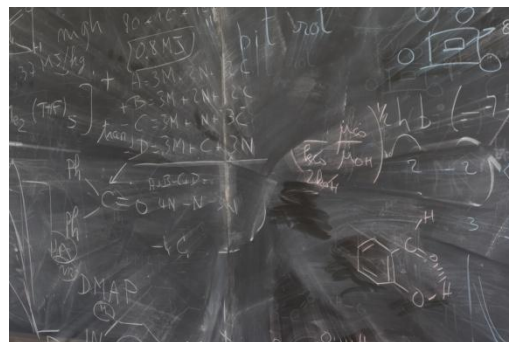
ECTS	COURS	TD	TP
6	20	18	

**Equipe pédagogique** : Stefano EVANGELISTI, Franck JOLIBOIS, Thierry LEININGER, Marie-Catherine HEITZ

**Pré-requis** : une bonne maîtrise d'un ouvrage type « Molecular Quantum Mechanics », P. W. Atkins, R. S. Friedman (Oxford University Press, 3rd edition, 1999). Cf aussi le cours « Bases de chimie théorique » sur le site Moodle de l'UPS (identifiant UPS requis) : <http://moodle.ups-tlse.fr/course/view.php?id=1078>



**Objectif :** L'objectif est d'enseigner le formalisme sous-jacent des principales méthodes de la chimie quantique. A l'issue du cours, les étudiants seront en mesure d'effectuer des calculs avec les principaux logiciels utilisés dans le domaine et d'en interpréter, avec un point de vue critique, les résultats numériques.



**Programme :**

- Résolution de l'équation de Schrödinger
  - Hamiltonien moléculaire non-relativiste (Expression générale, Approximation de Born-Oppenheimer, Unités atomiques)
  - Méthode Hartree-Fock (Equations de Hartree-Fock, Théorème de Koopman's, Introduction d'une base : équations de Roothaan, Matrice densité et calcul de propriétés )
  - Fonctions de base atomiques (STO et GTO, Convergence des développements en orbitales )
  - Corrélacion électronique (Singularité de l'Hamiltonien, trou de Coulomb, Théorème de Kato, Méthodes d'interaction de configuration, Méthodes perturbatives du type Möller-Plesset, Coupled-Cluster)
  - Etats excités (Interaction de configuration multi-référence, MCSCF et CASSCF)
- Dynamique quantique - dynamique des processus photo-induits:
  - approximation de Born-Oppenheimer - propagation de paquet d'ondes, théorème d'Ehrenfest
  - processus photo-induits : lien spectre d'absorption et dynamique, processus élémentaires: processus directs/indirects, IVR, fragmentation
  - processus non-adiabatiques: représentations diabatiques/adiabatiques, règles de non-croisement, intersections coniques, conversion interne, croisement intersystème
  - dynamique classique et mixte
  - spectroscopie résolue en temps et contrôle par laser des processus moléculaires
- Dynamique moléculaire classique
  - Propagation des équations de mouvement (Type de propagateur : Verlet, Verlet-vitesse, prédicteur- correcteur,... Formulation de Liouville, Factorisation de Trotter, Performance des propagateurs)
  - Dynamique moléculaire « au vol » (Potentiel classique : Champ de force,... Potentiel quantique : Dynamique moléculaire « ab initio », « Car – Parrinello », « Born-Oppenheimer » , Le problème des forces en dynamique moléculaire ab initio. )
  - Au delà de l'ensemble microcanonique (Ensemble canonique (NVT) : Thermostats (Berendsen, Langevin, Nosé – Hoover), Ensemble isothermal-isobarique (NPT) : Barostats )
  - Vers la réactivité : calcul de l'énergie libre (Méthode dite « Umbrella sampling » Métadynamique , Ensemble « blue moon »
  - Calcul de propriétés (Fonction d'autocorrélation, Moyenne statistique)

**Ouvrages conseillés :** A. Szabo, N. Ostlund, Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, Dover Publications Inc. (2000) ; I. N. Levine, Quantum Chemistry, Prentice Hall (6th edition, 2008)

**Modalités de contrôle des connaissances :**

**Session 1 :** CT 100% (écrit)

**Session 2 :** CT 100% (oral)

## UE14 – MODULE DU LABEL « RESEAU FRANÇAIS DE CHIMIE THEORIQUE »

**Responsable** : Romuald POTEAU ✉ LPCNO-IRSAMC-UPS/INSAT, 135 avenue de Ranguéil, 31077 Toulouse Cedex, Bat DGP, porte 133 📧 [Romuald.Poteau@univ-tlse3.fr](mailto:Romuald.Poteau@univ-tlse3.fr) ☎ téléphone : 05 61 55 96 64

ECTS	COURS	TD	TP
6	20	20	

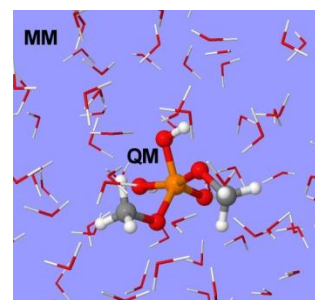
**Equipe pédagogique** : Ces UEs sont mutualisées au sein du Pôle Sud-Ouest du Réseau Français de Chimie Théorique (RFCT) et impliquent donc des enseignants des différents centres universitaires du Pôle. Les responsabilités pédagogiques de ces UEs sont assumées alternativement par les équipes des divers centres

**Pré-requis** : très variables selon les modules proposés. Il est cependant recommandé de posséder des notions de base en atomistique, liaison chimique et spectroscopies.

**Objectif** : En fonction des modules, l'objectif peut aussi bien être une découverte des principaux outils de la chimie théorique et computationnelle qu'un approfondissement des méthodes.

**Programme** : Les contenus des enseignements ne sont donc pas figés. Les grandes thématiques abordées au cours des trois années écoulées sont données ci-dessous.

- Détermination et exploration de surfaces d'énergie potentielle
- Calcul de fonction d'ondes et réactivité de surfaces cristallines
- Effets relativistes
- Simulation de spectres infra-rouge
- Physique statistique
- Méthodes hybrides pour la description de systèmes moléculaires étendus



**Ouvrages conseillés** : C. Cramer, Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, Wiley (2<sup>nd</sup> edition, 2004) ; A. Leach, Molecular Modelling: Principles and Applications, Prentice Hall (2nd edition, 2001)

**Modalités de contrôle des connaissances** :

**Session 1** : CT 100% (écrit)

**Session 2** : CT 100% (oral)

## UE15 – MODULE THEMATIQUE A LA CARTE

**Responsable** : Romuald POTEAU ✉ LPCNO-IRSAMC-UPS/INSAT, 135 avenue de Ranguéil, 31077 Toulouse Cedex, Bat DGP, porte 133 📧 [Romuald.Poteau@univ-tlse3.fr](mailto:Romuald.Poteau@univ-tlse3.fr) ☎ téléphone : 05 61 55 96 64

ECTS	COURS	TD	TP
3			

**Le nombre d'heures et les pré-requis** : dépendent du module choisi

**Objectif** : Ce module thématique permettra de compléter la formation des étudiants du Master. Suite à la mise en place du RFCT, nous disposons déjà d'un fonds documentaire sous une forme facilitant leur mise à disposition pour l'Enseignement à Distance. Nous prévoyons également que les étudiants choisissent d'autres modules de master, à Toulouse ou dans d'autres Universités du pôle. A Toulouse, cela permettra une mutualisation non seulement avec le Master de Chimie, mais aussi le Master de Physique de la Matière ou encore le Master de Physique et Chimie pour le Vivant et la Santé. En ouvrant davantage la formation, il est même envisageable que ces modules soient puisés dans les enseignements d'informatique de l'UPS (au niveau L3-M1), parfaissant ainsi la double compétence « informatique-chimie théorique et modélisation » de nos étudiants.

## Semestre 10

Durée : 5 mois

ERACFABM  
ERACHTBM

## LANGUES / ANGLAIS

## Responsable(s) :

Philippe MURILLO ✉ Bât 4A, RDC côté Molliard, bureau 13.  
 Laurence ROUSSILLON-CONSTANTY, ✉ Bât 4A, 2e étage côté Molliard, bureau 125.

✉ Département des Langues Vivantes et de la Gestion, 118 Route de Narbonne, Bât.4A, porte  
 135, 31062 Toulouse cedex 9

☎ 05 61 55 64 28 📧 philippe.murillo@univ-tlse3.fr / laurence.roussillon-constanty@univ-tlse3.fr  
<http://langues.ups-tlse.fr/>

ECTS	COURS	TD	TP
3		24	

*Remarque* : Bien que les enseignements aient lieu au semestre 9, cette UE fait partie du semestre 10.

## Enseignant :

Claire CHAPLIER ✉ Bât 4A, RDC côté Molliard, bureau 213. 📧 [claire.chaplier@univ-tlse3.fr](mailto:claire.chaplier@univ-tlse3.fr)

## Objectifs / Généralités :

Développer les compétences indispensables aux étudiant/es en vue de leur intégration dans la vie professionnelle. Perfectionner les outils de communication permettant de s'exprimer dans le contexte international d'aujourd'hui et acquérir l'autonomie linguistique nécessaire à cette intégration.

## Pré-requis :

Niveau B2+ / CLES 2

## Contenu :

24 étudiants / groupe

Les cours auront lieu sous forme de TD pour un volume total de 24h.

Les séances sont de 2h.

Tutorat/autoformation 8hTD apporte un suivi individualisé via la plate-forme d'enseignement Moodle UPS.

Ateliers de conversation (sous réserve d'Assistant de Langue)

## Modalités de contrôle des connaissances :

*Absences aux épreuves de contrôles continus :*

- *Absence justifiée* : l'épreuve doit être rattrapée sous condition de présentation d'un justificatif dûment validé au secrétariat du Département de Langues Vivantes dans les 10 jours ouvrables ;
- *Absence injustifiée* : la note attribuée est zéro.

Les étudiants voulant bénéficier d'une dispense d'assiduité doivent se présenter à l'enseignant(e) responsable au début du semestre.

**Session 1** : CC (70%) et **Test d'évaluation de l'autoformation** (30%)

**Session 2** : CC (30%): session 1 report et **test d'évaluation de l'autoformation** (70%)

**ERACFAAM**  
**ERACHTAM**

## STAGE EN LABORATOIRE

**Responsable** : Nancy de Viguerie ✉ IMRCP, Bat 2R1, UMR CNRS 5623  
Université Paul Sabatier 31062 Toulouse Cedex 09 E-mail : [viguerie@chimie.ups-tlse.fr](mailto:viguerie@chimie.ups-tlse.fr),  
☎ téléphone : 05 61 55 61 35

ECTS	durée
27	5 mois

Il se déroule de janvier à Juin ou de mars à juin pour les étudiants de l'ENSIACET. Il donne lieu à un mémoire de 15 pages dont la soutenance a lieu fin juin. L'étudiant présente son mémoire devant un jury permanent constitué de 5 enseignants-chercheurs ou chercheurs. En fonction du nombre d'étudiants, un ou deux jurys permanents seront formés. Chaque jury est constitué d'un représentant de chaque spécialité/parcours et d'un coordonnateur désigné par le Conseil de Formation du M2 Chimie recherche. Pour un total de 300 points, l'exposé comptera pour 80 points, le rapport écrit pour 50 points, les réponses aux questions pour 120 points. La note de stage donnée par le responsable de stage sera sur 50 points.

Les stages ont lieu majoritairement dans les laboratoires de chimie reconnus par l'Ecole Doctorale (ED) de Sciences de la Matière dont la liste est présentée ci-dessous. Un certain nombre de stages peut se faire dans des laboratoires universitaires ou industriels n'appartenant pas à l'ED.

- Laboratoire de Chimie de Coordination (LCC-UPR 8241. Directeur : A. BOUSSEKSOU)  
<http://www.lcc-toulouse.fr>

- Laboratoire de Synthèse et Physico-chimie de Molécules d'Intérêt Biologique (SPCMIB-UMR 5068. Directeur : Y. Génisson)  
<http://spcmib.ups-tlse.fr>

- Laboratoire Hétérochimie Fondamentale et Appliquée (HFA-UMR 5069. Directeur : D. Bourrissou)  
<http://hfa.ups-tlse.fr>

- Laboratoire des Interactions Moléculaires et Réactivité Chimique et Photochimique (IMRCP-UMR 5623. Directeur : C. Mingotaud)

<http://imrcp.ups-tlse.fr>

- Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques (LCPQ-UMR 5626. Directeur : T. Leininger)  
<http://www.lcpq.ups-tlse.fr>
  
- Laboratoire de Physique et Chimie des Nanoobjets (LPCNO-UMR 5215 INSA/CNRS/UPS.  
Directeur : B. Chaudret)  
<http://lpcno.insa-toulouse.fr>
  
- Centre d'Élaboration de Matériaux et d'Études Structurales (CEMES-UPR 8011. Directeur : A. Claverie) Equipe de chimie moléculaire : A. Gourdon, J. Bonvoisin et G. Rapenne  
<http://www.cemes.fr>  
puis GNS dans la rubrique recherche.
  
- Pharmacochimie and pharmacology for the development (PHARMA-DEV),  
<http://www.ird.fr/umr152/>, <http://www.pa3s.org/fr> , <http://www.ups-tlse.fr>
  
- Laboratoire de Chimie AgroIndustrielle (LCA – UMR 1010 INRA/INPT-ENSIACET. Directeur : Pr. C. Vaca-Garcia)  
<http://lca.ensiacet.fr/>

## CHOIX ET ATTRIBUTIONS DES STAGES :

Les étudiants ont la charge de trouver un laboratoire d'accueil et un responsable de stage pour effectuer le stage de recherche, qui conformément à la réglementation en vigueur (décret n°2009-885 du 21 juillet 2009) devra donner lieu à une gratification de la part du laboratoire d'accueil. Pour les aider dans leur choix, ils auront à leur disposition un document regroupant toutes les propositions de stage faites par les laboratoires et équipes de recherche de l'école Doctorale Sciences de la Matière qui leur sera donné **fin septembre**, au cours d'une réunion d'information sur les stages. Au cours de cette réunion, des informations sur la possibilité d'effectuer leur stage à l'étranger leur seront données.

### **Le responsable de stage décidera de retenir ou non la candidature d'un stagiaire.**

Les étudiants devront transmettre un classement comportant trois sujets de stage par ordre de préférence. L'encadrant est tenu d'informer Madame de Viguerie ([viguerie@chimie.ups-tlse.fr](mailto:viguerie@chimie.ups-tlse.fr)) du candidat choisi. Il devra également en informer le candidat retenu. Dans le cas de candidats agréés simultanément par plusieurs responsables de stage, le choix définitif du lieu de stage reviendra à l'étudiant.

Les propositions de l'Ecole Doctorale ne sont pas limitatives, la possibilité de trouver un stage hors Toulouse en secteur académique ou industriel reste ouverte. Dans ce cas, le choix du stage devra être **obligatoirement validé par le responsable de la spécialité/parcours**. Le titre du sujet de stage, le nom du Laboratoire ou de la Société, le nom de l'encadrant et ses coordonnées électroniques devront être transmis à Madame de Viguerie le plus tôt possible avant le début du stage. Un stage en rapport avec la spécialité choisie est souhaitable pour l'homogénéité du cursus mais cela n'est pas obligatoire, sauf pour la spécialité chimie physique et théorique.

## SOUTENANCES DE STAGE :

Les soutenances de stages auront lieu fin juin. Le candidat exposera son travail pendant 10 minutes et répondra aux questions du rapporteur (environ 10 minutes) et du jury permanent (5 minutes)

**Modalités de contrôle des connaissances :**

- Rapport : 50 points/300 points
- Exposé de 10 minutes : 80 points/300 points
- Réponses aux questions : 120 points /300 points
- Appréciation du stage par l'encadrant : 50 points /300 points