



# 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

Sélection sur dossier :

- Nationaux et communauté européenne : Ecandidat
- Hors Europe : procédure Etudes en France

---

## 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

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

### M1S2 CTM

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

## M2 - Chimie théorique et modélisation

### M2S3 CTM

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

### M2S4 CTM



Stage 5-6 mois

30 crédits