

## MASTER - Chimie

### Chémoïnformatique

#### Pré-requis obligatoires

La soumission du dossier de candidature se fait intégralement en ligne sur [ecandidat.unistra.fr](http://ecandidat.unistra.fr). Les conditions d'admission sont les suivantes :

##### en M1

- être titulaire d'une licence de chimie ou physique-chimie ou chimie et biologie ou d'un diplôme reconnu équivalent par la commission pédagogique
- être retenu par la commission pédagogique lors d'un entretien lorsque le dossier a été jugé recevable.

##### en M2

- être titulaire d'un M1 de chimie en adéquation avec la filière de M2 choisie, ou d'un diplôme reconnu équivalent par la commission pédagogique
- être retenu par la commission pédagogique lors d'un entretien lorsque le dossier a été jugé recevable
- être accepté par un responsable de laboratoire pour le stage de fin de master

Langue du parcours	Anglais
ECTS	120 ECTS
Volume horaire	
TP : 0h	TD : 0h
CI : 0h	CM : 0h
Formation initiale	Oui
Formation continue	Non
Apprentissage	Non
Contrat de professionnalisation	Non
Stage : (durée en semaines)	30

#### Recruitment of students and requested background

A committee decides on the specific criteria and the requested background for acceptance in the master program. This committee, the so called "Commission Pédagogique," includes professors involved in the first and second year of the master M1 teaching and M2, as well as the professors responsible for the master program.

Given the multidisciplinary nature of this master program, students from other universities or other master programs may be accepted after evaluation of their background. A valid M1 is necessary at any time. Students may be invited for an interview before each admission.

It is noted that sufficient command of English is necessary, knowledge of French is desirable. As already said, all lectures are performed in English, including evaluation

#### Compétences à acquérir

Cette filière de master est spécialisée en chémoïnformatique. Cette discipline vise à collecter, stocker et modéliser l'information en chimie. Les compétences visées par cette spécialité sont la modélisation en chimie, l'informatique et les statistiques. Les métiers visés sont : modélisateur en chimie, chimie-physique et chimie thérapeutique, analyste opérationnel, ingénieur d'études et développement, architecte/administrateur de chimiothèques, support technique informatique et logiciel en chimie.

#### Poursuite d'études

Les métiers visés sont : modélisateur en chimie, chimie-physique et chimie thérapeutique, analyste opérationnel, ingénieur d'études et développement, architecte/administrateur de chimiothèques, support technique informatique et logiciel en chimie.

#### Modalités pédagogiques

#### Contacts

- Gilles Marcou : [g.marcou@unistra.fr](mailto:g.marcou@unistra.fr)
- Alexandre Varnek : [varnek@unistra.fr](mailto:varnek@unistra.fr)

# Master 1 CPIAM - Chimie physique, informatique, analytique et matériaux

## Semestre 1 CPIAM - Chimie physique, informatique, analytique et matériaux

	ECTS	CM	CI	TD	TP	TE	Stage
TP transverses	4 ECTS						
TP transverses					72 h		
Electrochemistry	3 ECTS						
Electrochemistry			24 h				
Spectroscopies optiques	3 ECTS						
Spectroscopies optiques			24 h				
Modélisation - introduction	5 ECTS						
Basics of electronic structure calculations and introduction to DFT		18 h			9 h		
Molecular modelling		10 h			8 h		
Chemoinformatics		10 h			10 h		
Cinétique et thermodynamique	3 ECTS						
Cinétique et thermodynamique			24 h				
Matériaux - introduction	3 ECTS						
Matériaux - introduction			24 h				
Méthodes statistiques	3 ECTS						
Méthodes statistiques		16 h		8 h			
CPIAM-M1S1 Bloc d'UEs à choix (pour un total de 6 ECTS)							
Chimie organique	3 ECTS						
Chimie organique			24 h				
Chimie inorganique	3 ECTS						
Chimie inorganique			24 h				
Structure et diffraction	3 ECTS						
Structure et diffraction			24 h				
Chimie analytique au service de la science et de la société	3 ECTS						
Chimie analytique au service de la science et de la société			24 h				
Algorithmique et programmation	6 ECTS		38 h		22 h		

## Semestre 2 CPIAM - Chimie physique, informatique, analytique et matériaux

	ECTS	CM	CI	TD	TP	TE	Stage
NMR spectroscopy	3 ECTS						
NMR spectroscopy		16 h		8 h			
Complex systems and non-equilibrium kinetics	3 ECTS						
Complex systems and non-equilibrium kinetics			24 h				
Pratique expérimentale en laboratoire de recherche ou stage en entreprise	9 ECTS						
Pratique expérimentale en laboratoire de recherche ou stage en entreprise							10 sem
Préparation à l'insertion professionnelle	3 ECTS						
Préparation à l'insertion professionnelle			28 h				
CPIAM-M1S2 Bloc d'UEs pour orientation M2 (pour un total de 12 ECTS)							
Chimie physique et matériaux	12 ECTS						
Matériaux nanostructurés			24 h				
Chimie moléculaire de l'état solide			24 h				
TP Chimie physique					40 h		
TP Chimie des matériaux					40 h		
Sciences analytiques	12 ECTS						
Méthodes séparatives et spectrométrie		22 h		6 h			
Métrologie et validation des méthodes d'analyse		20 h		8 h			
TP Instrumentation					40 h		
TP Chimie analytique					40 h		
Informatique	12 ECTS	54 h	48 h	12 h	10 h		
Systèmes d'exploitation et réseaux			24 h				
Chemical databases and introduction to data sciences			24 h				
Modeling of supramolecular architectures			16 h				
Electronic structure and DFT		26 h					
Programmation orientée objets		12 h		12 h	10 h		

## Master 2 Chémoinformatique

### Semestre 3 - Chémoinformatique

	ECTS	CM	CI	TD	TP	TE	Stage
<b>Chémoinformatique</b>	<b>9 ECTS</b>						
Chémoinformatique 1		16 h		8 h			
Chémoinformatique 2		16 h		8 h			
Chémoinformatique 3		16 h		8 h			
<b>Technologie et applications</b>	<b>12 ECTS</b>		74 h				
Data mining			24 h				
Internet technologies			30 h				
Découverte de médicaments			20 h	8 h			
Structure-based computer assisted drug design		10 h		1 h	13 h		
<b>Modelling</b>	<b>9 ECTS</b>						
Structural biology and molecular modelling		16 h		8 h			
Molecular dynamics simulation			24 h				
Advanced quantum chemistry		16 h		8 h	8 h		

### Semestre 4 - Chémoinformatique

	ECTS	CM	CI	TD	TP	TE	Stage
Stage en laboratoire de recherche ou en entreprise Training period	30 ECTS						20 sem