

**OFFRE DE FORMATION  
L.M.D.**

**MASTER ACADEMIQUE**

<b>Etablissement</b>	<b>Faculté / Institut</b>	<b>Département</b>
<b>Université des Sciences et de la Technologie d'Oran Mohamed Boudiaf USTO MB</b>	<b>Chimie</b>	<b>Chimie Physique</b>

<b>Domaine</b>	<b>Filière</b>	<b>Spécialité</b>
<b>Sciences de la Matière</b>	<b>Chimie</b>	<b>Chimie Théorique et Computationnelle</b>

**Responsable de l'équipe du domaine de formation :**

**Madame HAMDACHE Fatima**

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية  
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي

عرض تكوين

ل. م . د

ماستر أكاديمي

القسم	الكلية/ المعهد	المؤسسة
الكيمياء الفيزيائية	الكيمياء	جامعة العلوم و التكنولوجيا محمد بوضياف وهران

التخصص	الشعبة	الميدان
الكيمياء النظرية و الحاسوبية	كيمياء	علوم المادة

مسؤول فرقة ميدان التكوين :  
السيدة : حمداش فاطمة

# SOMMAIRE

I - Fiche d'identité du Master	-----
1 - Localisation de la formation	-----
2 – Coordonateurs	-----
3 - Partenaires extérieurs éventuels	-----
4 - Contexte et objectifs de la formation	-----
A - Organisation générale de la formation : position du projet	-----
B - Conditions d'accès	-----
C - Objectifs de la formation	-----
D - Profils et compétences visées	-----
E - Potentialités régionales et nationales d'employabilité	-----
F - Passerelles vers les autres spécialités	-----
G - Indicateurs de suivi du projet de formation	-----
5 - Moyens humains disponibles	-----
A - Capacité d'encadrement	-----
B - Equipe d'encadrement de la formation	-----
B-1 : Encadrement Interne	-----
B-2 : Encadrement Externe	-----
B-3 : Synthèse globale des ressources humaines	-----
B-4 : Personnel permanent de soutien	-----
6 - Moyens matériels disponibles	-----
A - Laboratoires Pédagogiques et Equipements	-----
B- Terrains de stage et formations en entreprise	-----
C - Laboratoires de recherche de soutien à la formation proposée	-----
D - Projets de recherche de soutien à la formation proposée	-----
E - Documentation disponible	-----
F - Espaces de travaux personnels et TIC	-----
II - Fiche d'organisation semestrielle des enseignements	-----
1- Semestre 1	-----
2- Semestre 2	-----
3- Semestre 3	-----
4- Semestre 4	-----
5- Récapitulatif global de la formation	-----
III - Fiche d'organisation des unités d'enseignement	-----
IV - Programme détaillé par matière	-----
V – Accords / conventions	-----
VI – Curriculum Vitae des coordonateurs	-----
VII - Avis et Visas des organes administratifs et consultatifs	-----
VIII - Visa de la Conférence Régionale	-----

## **I – Fiche d'identité du Master**

## 1 - Localisation de la formation :

Faculté (ou Institut) : Chimie  
Département : Chimie Physique  
Section :

## 2 – Coordonateurs :

### - Responsable de l'équipe du domaine de formation

(Professeur ou Maître de conférences Classe A) :

Nom & prénom : HAMDACHE Fatima

Grade : Professeur

☎ : 0555 12 01 62 Fax : 041 62 71 72 E - mail : hamdache\_fa@yahoo.fr

Joindre un CV succinct en annexe de l'offre de formation (maximum 3 pages)

### - Responsable de l'équipe de la filière de formation

(Maitre de conférences Classe A ou B ou Maitre Assistant classe A) :

Nom & prénom : BENOUALI Djillali

Grade : Maitre de Conférences B

☎ : 0795 52 38 51 Fax : 041 62 71 72 E - mail : benouali2001@yahoo.fr

Joindre un CV succinct en annexe de l'offre de formation (maximum 3 pages)

### - Responsable de l'équipe de spécialité

(au moins Maitre Assistant Classe A) :

Nom & prénom : TCHOUAR Nouredine

Grade : Professeur

☎ : 0554 97 85 72 Fax : 041 62 71 72 E - mail : lamosi2002@yahoo.fr

Joindre un CV succinct en annexe de l'offre de formation (maximum 3 pages)

## 3- Partenaires extérieurs \*:

- autres établissements partenaires :

- Professeur Ould Kaddour Fouzia, Laboratoire de Physique Théorique, Université Abou Bakr Belkaid, Tlemcen.
- Professeur Belaidi Salah, Laboratoire de Chimie Moléculaire et l'Environnement, Université Mohamed Khider, Biskra.

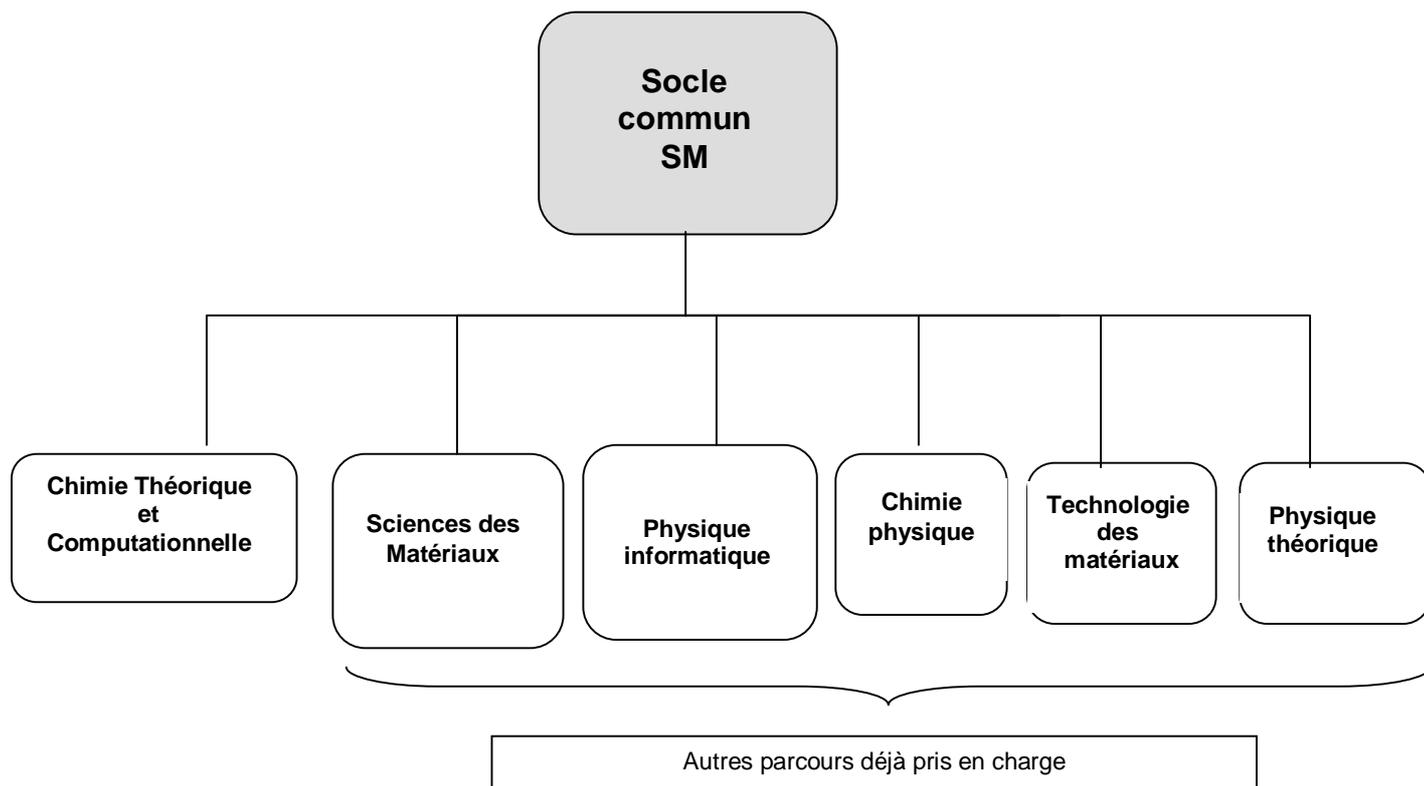
- Partenaires internationaux :

- Professeur Abdenacer Idrissi, Laboratoire de Spectrochimie Infrarouge et Raman LASIR, Université Lille1 des Sciences et Technologies, Lille, France.
- Docteur Peter Reinhardt, Laboratoire de Chimie Théorique, Université Pierre et Marie Curie Paris6, Paris, France.
- Professeur Ari P Seitsonen, Institut de Physique-Chimie, Université de Zurich, Suisse.
- Professeur Abdou Boucekkine, Institut des Sciences Chimiques de Rennes, Université de Rennes1, France.
- Docteur Thierry Tassaing - *CNRS Researcher* Institut des Sciences Moléculaires - Université Bordeaux 1, France.

## 4 – Contexte et objectifs de la formation

### A – Organisation générale de la formation : position du projet

*Si plusieurs Masters sont proposés ou déjà pris en charge au niveau de l'établissement (même équipe de formation ou d'autres équipes de formation), indiquez dans le schéma suivant, la position de ce projet par rapport aux autres parcours.*



**B – Conditions d'accès** (*indiquer les parcours types de licence qui peuvent donner accès à la formation Master proposée*)

- 1- Licence en Sciences de la Matière (SM)
- 2- Licence en Sciences et Technologies (ST)
- 3- Licence en Sciences Naturelles et la Vie (SNV)
- 4- Licence en Mathématiques et Informatique (MI)
- 5- DES Chimie Générale
- 6- DES Physique Générale

Peuvent avoir accès des étudiants de niveau ingénieur d'application ou ingénieur d'Etat

**C - Objectifs de la formation** (*compétences visées, connaissances acquises à l'issue de la formation- maximum 20 lignes*)

La chimie théorique et computationnelle, couplée aux techniques de chimie-physique est devenue un partenaire indispensable à l'expérimentation. Le développement des moyens informatiques et la puissance des ordinateurs de plus en plus grande, ont contribué largement à l'émergence de méthodes de calculs théoriques et de simulations numériques très élaborées en chimie comme en physique. Il est donc naturel que la chimie théorique ainsi que le savoir-faire inhérent à cette spécialité soient enseignés.

L'objectif de la spécialité « Chimie Théorique et Computationnelle » est de donner une formation rigoureuse dans le domaine de la chimie théorique appliquée aux études de propriétés de systèmes physico-chimiques complexes. Elle s'adresse à tous ceux qui souhaitent mettre en œuvre les concepts, les méthodes numériques et les compétences informatiques de cette discipline, en relation avec l'expérience.

Cette formation consistera à faire comprendre le rôle des méthodes théoriques et spectroscopiques en chimie pour la prédiction, l'interprétation et la compréhension des propriétés physico-chimiques et de la réactivité des systèmes moléculaires complexes ; mais également à renforcer les connaissances tant sur le plan théorique que sur le plan expérimental dans le domaine de la chimie théorique et computationnelle de façon à permettre aux jeunes chercheurs d'acquérir les connaissances nécessaires à la poursuite de leurs études en Doctorat.

Les principaux thèmes abordés dans cette formation, se feront selon deux approches : théorique et expérimentale. Les méthodes de caractérisation de la matière couplées aux méthodes théoriques de la chimie quantique moderne, permettront d'offrir une formation pluridisciplinaire autonome aux étudiants destinés à la recherche.

## **D – Profils et compétences visées** (*maximum 20 lignes*) :

Le diplômé de la spécialité « Chimie Théorique et Computationnelle » sera capable de :

- Relier les approches spectroscopiques aux approches de chimie théorique.
- Utiliser à bon escient les principales méthodes de chimie quantique et de modélisation moléculaire (applications).
- Traiter des réactivités chimiques et/ou accompagner des analyses structurales.
- Aborder le développement de nouveaux outils théoriques adaptés à de nouveaux problèmes.

Il aura également acquis une première expérience (stage en laboratoire) du travail de recherche et de la conduite d'un projet au sein d'une équipe.

## **E- Potentialités régionales et nationales d'employabilité**

Doter les entreprises et les universités de la région de cadres compétents pouvant investir leur savoir faire dans le secteur de la recherche fondamentale et appliquée.

Etant donné le cursus proposé dans le cadre de cette formation, les diplômés seront capables d'intégrer différents secteurs :

- Enseignement Secondaire et Supérieur
- Laboratoires de Recherche
- Bureaux d'Etudes
- Secteur Industriel

## **F – Passerelles vers les autres spécialités**

Le Master académique « Chimie Théorique et Computationnelle », offre aux étudiants une formation pluridisciplinaire autonome et ceci par l'acquisition de connaissances théoriques et pratiques dans les domaines de la caractérisation de la matière couplées aux méthodes théoriques de la chimie quantique moderne.

Il ne devrait donc pas y avoir de difficulté pour une réinsertion dans des formations de master en Chimie physique au niveau local ou national.

## **G – Indicateurs de suivi du projet**

### 1- Recherche bibliographique

Le projet bibliographique correspond à une activité scientifique encadrée par un enseignant-chercheur. C'est un travail personnel de recherche bibliographique, il donne lieu à la rédaction d'un mémoire. L'étudiant se livre ainsi à une démarche qui complète sa formation théorique.

L'étude consiste à réaliser un état de l'art sur un sujet particulier par l'identification et l'exploitation d'un nombre de références bibliographiques portant sur le thème de recherche dans l'un des domaines des formations proposées par le Master.

Ce projet constitue une phase préparatoire au stage de recherche que les étudiants effectuent à temps plein au 4<sup>ème</sup> semestre du Master.

A partir du sujet du stage de recherche qui leur a été attribué, les étudiants doivent :

- Rechercher la documentation scientifique appropriée : ouvrages, articles de revues, informations en ligne....
- Analyser les données récoltées
- Rédiger un document écrit synthétique
- Préparer une soutenance orale sur le sujet choisi

### 2- Le stage d'initiation à la recherche

Le stage se déroulera dans un laboratoire spécialisé de chimie théorique, et fera l'objet d'un rapport et d'une soutenance orale devant un jury qui délivre une note de stage.

## 5 – Moyens humains disponibles

**A : Capacité d'encadrement** (exprimé en nombre d'étudiants qu'il est possible de prendre en charge) :

La capacité d'encadrement est de 10 étudiants au plus.

**B : Equipe d'encadrement de la formation :**

**B-1 : Encadrement Interne :**

Nom, prénom	Diplôme	Grade	Laboratoire de recherche de rattachement	Type d'intervention *	Emargement
TCHOUAR Noureddine	Doctorat en Chimie	Pr	Laboratoire de Modélisation et d'Optimisation des Systèmes Industriels (LAMOSI)	Cours, TD, TP + Encadrement de mémoire	
BEKKA Ahmed	Doctorat en Physique	Pr		Cours et TD	
ALI-OTHMANE Adil	Doctorat en Chimie	Pr		Cours et TD	
KACIMI Larbi	Doctorat en Chimie	Pr	Laboratoire des Eco-Matériaux Fonctionnels et Nanostructurés	Cours et TD	
BENOUALI Djillali	Doctorat en Chimie	MCA		Cours, TD + Encadrement de mémoire	

<b>NEMICHE Nardjesse</b>	<b>Doctorat en Chimie</b>	<b>MCB</b>		<b>Cours, TD + Encadrement de mémoire</b>	
<b>BENTAYEB Kamel</b>	<b>Magister en Chimie</b>	<b>MAA</b>	<b>LAMOSI</b>	<b>Cours, TD + Encadrement de mémoire</b>	
<b>AMARA Sarah</b>	<b>Magister en Chimie</b>	<b>MAA</b>	<b>LAMOSI</b>	<b>Cours, TD, TP + Encadrement de mémoire</b>	
<b>SAYAD Nasreddine</b>	<b>Magister en Informatique</b>	<b>MAB</b>	<b>LAMOSI</b>	<b>Cours, TP + Encadrement de stage</b>	
<b>OUADAH Karim</b>	<b>Magister en Biotechnologie</b>	<b>MAA</b>	<b>LAMOSI</b>	<b>Cours, TD, TP + Encadrement de mémoire</b>	
<b>NEKKAZ Karima</b>	<b>Magister en chimie théorique</b>	<b>MAA</b>		<b>Cours, TD, TP + Encadrement de mémoire</b>	
<b>HAMOU Zakia</b>	<b>Magister en chimie théorique</b>	<b>MAA</b>		<b>Cours, TD, TP + Encadrement de mémoire</b>	

<b>MELLALI Fatima Zohra Niema</b>	<b>Magister en chimie théorique</b>	<b>MAA</b>		<b>Cours, TD, TP + Encadrement de mémoire</b>	
---------------------------------------	---	------------	--	---	--

**\* = Cours, TD, TP, Encadrement de stage, Encadrement de mémoire, autre ( à préciser)**

## B-2 : Encadrement Externe :

Nom, prénom	Diplôme	Etablissement de rattachement	Type d'intervention *	Emargement
Pr. BELAIDI Salah	Doctorat en Chimie	Laboratoire de Chimie Moléculaire et l'Environnement, Université Mohamed Khider, Biskra.	Cours, TD, TP + Encadrement de stage	
Pr. OULD-KADDOUR Fouzia	Doctorat en Physique	Laboratoire de Physique Théorique, Université Abou Bakr Belkaid, Tlemcen	Cours, TP + Encadrement de stage	
Pr. IDRISSI Abdenacer	Doctorat en Chimie	Laboratoire de Spectrochimie Infrarouge et Raman LASIR (Université Lille1 – France)	Cours, TD, TP	
Pr. SEITSONEN Ari P.	Doctorat en Physique	Institut de Physique-Chimie (Université de Zurich, Suisse)	Cours, TD	
Dr. REINHARDT Peter	Doctorat en Chimie	Laboratoire de Chimie Théorique, Université Pierre et Marie Curie (Paris, France)	Cours	
Pr. BOUCEKKINNE Abdou	Doctorat en Chimie	Institut des Sciences Chimiques de Rennes, (Université de Rennes1, France)	Cours, TD + Co-Encadrement de mémoire	

Dr. TASSAING Thierry	Doctorat en Chimie	Institut des Sciences Moléculaires- (Université Bordeaux 1 CNRS UMR 5255 France)	Cours, TD	
----------------------	--------------------	--	-----------	---

\* = Cours, TD, TP, Encadrement de stage, Encadrement de mémoire, autre ( à préciser)

### B-3 : Synthèse globale des ressources humaines :

Grade	Effectif Interne	Effectif Externe	Total
Professeurs	4	5	9
Maîtres de Conférences (A)	1	2	3
Maîtres de Conférences (B)	1		1
Maître Assistant (A)	6		6
Maître Assistant (B)	1		1
Autre (préciser) :			
Total	13	7	20

### B-4 : Personnel permanent de soutien (indiquer les différentes catégories)

Grade	Effectif

## 6 – Moyens matériels disponibles

**A- Laboratoires Pédagogiques et Equipements :** Fiche des équipements pédagogiques existants pour les TP de la formation envisagée (1 fiche par laboratoire)

**Intitulé du laboratoire : Laboratoire de Modélisation et d'Optimisation des Systèmes Industriels(LAMOSI)**

**Capacité en étudiants : 10**

N°	Intitulé de l'équipement	Nombre	observations
1	Micro-ordinateur	10	
2	Stations de calculs HP	1	
3	Logiciels pédagogiques de modélisation et simulation	10	
4	Logiciel de recherche en modélisation et simulation	10	

**Intitulé du laboratoire : Laboratoire d'informatique**

**Capacité en étudiants : 10**

N°	Intitulé de l'équipement	Nombre	observations
1	Micro-ordinateur	10	
2	Réseau Internet	01	
3	Matériels et accessoires informatique et audio-visuel (data-show...)	03	

## B- Terrains de stage et formation en entreprise :

Lieu du stage	Nombre d'étudiants	Durée du stage
Laboratoire de Modélisation et d'Optimisation des Systèmes Industriels (LAMOSI) (USTO MB)	4 étudiants	2 mois et demi
Laboratoire de Chimie Moléculaire et l'Environnement, Université Mohamed Khider, Biskra.	4 étudiants	2 mois et demi
Laboratoire de Physique Théorique (Université Abou Bakr Belkaid, Tlemcen)	2 étudiants	2 mois et demi

**C- Laboratoire(s) de recherche de soutien à la formation proposée :**

<b>Chef du laboratoire : Pr. BENYETTOU Mohamed</b>
<b>N° Agrément du laboratoire</b>
Date :
Avis du chef de laboratoire :

## D- Projet(s) de recherche de soutien à la formation proposée :

Intitulé du projet de recherche	Code du projet	Date du début du projet	Date de fin du projet
Etude de la réactivité des flavones : analyse par simulation de dynamique moléculaire et par spectroscopie de vibration.	E01920140105	2015	2019

## E- Documentation disponible : *(en rapport avec l'offre de formation proposée)*

L'USTO MB, est dotée d'une Bibliothèque centrale riche en documentation scientifique répondant au besoin de la formation « Chimie Théorique et Computationnelle »

- CD-thèques, bibliothèque : livres de chimie générale, théorique, expérimentale, organique, inorganique, minérale...
- Bibliothèque numérique SNDL

## F- Espaces de travaux personnels et TIC :

- Réseaux wifi intranet et internet
- Plateforme Linux pour calcul théorique parallèle multitâche.
- Matériels et accessoires informatiques et audio-visuel : imprimantes, photocopieur, Data-Show pour vidéoconférences.
- Salle d'informatique
- Salle de lecture à la bibliothèque du département, et à la bibliothèque centrale

## **II – Fiche d'organisation semestrielle des enseignements**

(Prière de présenter les fiches des 4 semestres)

## 1- Semestre 1 :

Unité d'Enseignement	VHS	V.H hebdomadaire				Coeff	Crédits	Mode d'évaluation	
	14-16 sem	C	TD	TP	Autres			Continu	Examen
<b>UE fondamentales</b>									
<b>UEF1(O/P) Chimie Quantique</b>									
Atomistique et Liaison Chimique	75 h 00	1 h 30	1 h 30	2 h 00		3	6	x	x
Mathématiques Appliquées à la Chimie	45 h 00	1 h 30	1 h 30			2	4	x	x
<b>UEF2(O/P) Chimie Organique et Bio-organique</b>									
Chimie Organique	45 h 00	1 h 30	1 h 30			2	4	x	x
Chimie Bio-organique et Produits naturels	45 h 00	1 h 30	1 h 30			2	4	x	x
<b>UE méthodologie</b>									
<b>UEM1(O/P) Cristallochimie</b>									
Cristallochimie	45 h 00	1 h 30	1 h 30			3	5	x	x
<b>UEM2(O/P) Techniques d'analyses chimiques</b>									
Techniques d'analyses chimiques	52 h 30	1 h 30		2 h 00		2	4	x	x
<b>UE découverte</b>									
<b>UED1(O/P) Système d'Exploitation et Scripts</b>									
Système d'Exploitation et Scripts	22 h 30			1 h 30		1	1	x	x
<b>UE transversales</b>									

<b>UET1(O/P) Anglais</b>									
Anglais	45 h 00	1 h 30	1 h 30			2	2	x	x
<b>Total Semestre 1</b>	<b>375 h 00</b>	<b>10 h 30</b>	<b>9 h 00</b>	<b>5 h 30</b>		<b>17</b>	<b>30</b>		

## 2- Semestre 2 :

Unité d'Enseignement	VHS	V.H hebdomadaire				Coeff	Crédits	Mode d'évaluation	
	14-16 sem	C	TD	TP	Autres			Continu	Examen
<b>UE fondamentales</b>									
<b>UEF1(O/P) Modélisation des Propriétés Moléculaires</b>									
Modélisation des Propriétés Moléculaires	75 h 00	1 h 30	1 h 30	2 h 00		4	8	x	x
<b>UEF2(O/P) Chimie des Matériaux</b>									
Chimie des Matériaux	67 h 30	1 h 30	1 h 30	1 h 30		2	4	x	x
<b>UEF3(O/P) Incertitudes, validation de méthodes, Chimiométrie</b>									
Incertitudes, validation de méthodes, Chimiométrie	67 h 30	1 h 30	1 h 30	1 h 30		3	6	x	x
<b>UE méthodologie</b>									
<b>UEM1(O/P) Spectroscopies et Chimie Théorique</b>									
Spectroscopies et Chimie Théorique	75 h 00	1 h 30	1 h 30	2 h 00		5	9	x	x
<b>UE découverte</b>									
<b>UED1(O/P) Chimie du Vivant</b>									
Chimie du Vivant	45 h 00	1 h 30	1 h 30			1	1	x	x
<b>UE transversales</b>									

<b>UET1(O/P)</b> <b>Recherches et Analyses Bibliographiques : Outils et Supports</b>									
Recherches et Analyses Bibliographiques : Outils et Supports	45 h 00	1 h 30	1 h 30			2	2	x	x
<b>Total Semestre 2</b>	375 h 00	9 h 00	9 h 00	7 h 00		17	<b>30</b>		

### 3- Semestre 3 :

Unité d'Enseignement	VHS	V.H hebdomadaire				Coeff	Crédits	Mode d'évaluation	
	14-16 sem	C	TD	TP	Autres			Continu	Examen
<b>UE fondamentales</b>									
<b>UEF1(O/P)</b> <b>Modélisation Moléculaire</b>									
Modélisation Moléculaire : Applications	75 h 00	1 h 30	1 h 30	2 h 00		3	6	x	x
Dynamique Moléculaire et Calculs Monte-Carlo	75 h 00	1 h 30	1 h 30	2 h 00		3	6	x	x
<b>UEF2(O/P)</b> <b>Thermodynamique Statistique</b>									
Thermodynamique Statistique	67 h 30	1 h 30	1 h 30	1 h 30		3	6	x	x
<b>UE méthodologie</b>									
<b>UEM1(O/P)</b> <b>Chimométrie et Modélisation Moléculaire</b>									
Chimométrie et Modélisation Moléculaire	67 h 30	1 h 30	1 h 30	1 h 30		5	9	x	x
<b>UE découverte</b>									

<b>UED1(O/P) Drug Design</b>									
Drug Design	45 h 00	1 h 30	1 h 30			1	1	x	x
<b>UE transversales</b>									
<b>UET1(O/P) Logiciels et bases de données en Chimie</b>									
Logiciels et bases de Données en Chimie	45 h 00	1 h 30	1 h 30			2	2	x	x
<b>Total Semestre 3</b>	375 h 00	9 h 00	9 h 00	7 h 00		17	<b>30</b>		

#### 4- Semestre 4 :

Domaine : Sciences de la Matière (SM)  
Filière : Chimie  
Spécialité : Chimie Théorique et Computationnelle

Stage en entreprise sanctionné par un mémoire et une soutenance.

	VHS	Coeff	Crédits
Travail Personnel	105 h	5	9
Stage en entreprise	202 h 30	9	18
Séminaires	67 h 30	3	3
Autre (préciser)			
<b>Total Semestre 4</b>	<b>375 h</b>	<b>17</b>	<b>30</b>

**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	225 h	90 h	45 h	67 h 30	427 h 30
TD	225 h	67 h 30	45 h	67 h 30	405 h
TP	187 h 30	82 h 30	22 h 30	/	292 h 30
Travail personnel	/	105 h	/	/	105 h
Autre (préciser) :					
Stage :	202 h30	/	/	/	270 h
Séminaire :	/		22 h 30	45 h	
<b>Total</b>	<b>840 h</b>	<b>345 h</b>	<b>135 h</b>	<b>180 h</b>	<b>1500 h</b>
<b>Crédits</b>	<b>72</b>	<b>36</b>	<b>4</b>	<b>8</b>	<b>120</b>
<b>% en crédits pour chaque UE</b>	<b>60%</b>	<b>30%</b>	<b>3.33%</b>	<b>6.67%</b>	<b>100%</b>

### **III – Fiches d'organisation des unités d'enseignement** (Etablir une fiche par UE)

**Libellé de l'UE : Chimie Quantique****Filière :** Chimie**Spécialité :** Chimie Théorique et Computationnelle**Semestre :** S 1

Répartition du volume horaire global de l'UE et de ses matières	Cours : 45 h 00 TD : 45 h 00 TP: 30 h 00 Travail personnel :
Crédits et coefficients affectés à l'UE et à ses matières	UE : Fondamentale crédits : 10  Matière 1 : Atomistique et Liaison Chimique Crédits : 06 Coefficient : 03  Matière 2 : Mathématiques Appliquées à la Chimie Crédits : 04 Coefficient : 02
Mode d'évaluation (continu ou examen)	continu et examen
Description des matières	<b>Atomistique et Liaison Chimique:</b> -Maîtriser les concepts essentiels de la chimie théorique utiles pour la description des structures moléculaires, de leurs propriétés et de leur réactivité. -Comprendre les enjeux actuels de la chimie théorique.  <b>Mathématiques Appliquées à la Chimie :</b> -Rappeler les notions mathématiques de bases. -Simplifier considérablement le développement de la théorie en chimie.

**Libellé de l'UE : Chimie Organique et Bio-organique****Filière :** Chimie**Spécialité :** Chimie Théorique et Computationnelle**Semestre :** S 1

Répartition du volume horaire global de l'UE et de ses matières	Cours : 45 h 00 TD : 45 h 00 TP: Travail personnel :
Crédits et coefficients affectés à l'UE et à ses matières	UE : Fondamentale crédits : 08  Matière 1 : Chimie Organique Crédits : 04 Coefficient : 02  Matière 2 : Chimie Bio-organique et Produits naturels Crédits : 04 Coefficient : 02
Mode d'évaluation (continu ou examen)	continu et examen
Description des matières	<b>Chimie Organique:</b> -Maitriser divers fondamentaux et concepts en chimie organique. -Maitriser des notions de réactivités et sélectivités intrinsèques. - Comprendre les enjeux actuels de la chimie organique contemporaine.  <b>Chimie Bio-organique et Produits naturels:</b> -Apporter une connaissance solide sur la synthèse chimique des molécules bioorganiques.

**Libellé de l'UE : Cristallochimie****Filière :** Chimie**Spécialité :** Chimie Théorique et Computationnelle**Semestre :** S 1

Répartition du volume horaire global de l'UE et de ses matières	Cours : 22 h 30 TD : 22 h 30 TP: Travail personnel :
Crédits et coefficients affectés à l'UE et à ses matières	UE : Méthodologie crédits : 05  Matière 1 : Cristallochimie Crédits : 05 Coefficient : 03
Mode d'évaluation (continu ou examen)	continu et examen
Description des matières	<b>Cristallochimie:</b> -Acquérir les notions nécessaires à la description de la structure atomique des milieux matériels cristaux et molécules pour la compréhension raisonnée des phénomènes de la physique et de la chimie.

**Libellé de l'UE : Techniques d'analyses chimiques****Filière :** Chimie**Spécialité :** Chimie Théorique et Computationnelle**Semestre :** S 1

Répartition du volume horaire global de l'UE et de ses matières	Cours : 22 h 30 TD : TP: 30 h 00 Travail personnel :
Crédits et coefficients affectés à l'UE et à ses matières	UE : Méthodologie crédits : 04  Matière 1 : Techniques d'analyses chimiques Crédits : 04 Coefficient : 02
Mode d'évaluation (continu ou examen)	continu et examen
Description des matières	<b>Techniques d'analyses chimiques :</b> - Compétence sur l'utilisation raisonnée d'un ensemble de techniques d'analyses chimiques pour aboutir à la résolution de structure moléculaires et à la caractérisation de matériaux. - Connaissance des principes fondamentaux et des appareillages à mettre en œuvre. - Maîtriser l'exploitation qualitative et quantitative des analyses.

**Libellé de l'UE : Système d'Exploitation et Scripts****Filière :** Chimie**Spécialité :** Chimie Théorique et Computationnelle**Semestre :** S 1

Répartition du volume horaire global de l'UE et de ses matières	Cours : TD : TP: 22 h 30 Travail personnel :
Crédits et coefficients affectés à l'UE et à ses matières	UE : Découverte crédits : 01  Matière 1 : Système d'Exploitation et Scripts Crédits : 01 Coefficient : 01
Mode d'évaluation (continu ou examen)	continu et examen
Description des matières	<b>Système d'Exploitation et Scripts :</b> -Maîtrise des éléments matériels et logiciels d'un PC. -Connaissances de l'environnement graphique et des systèmes d'exploitation. -Notion de sécurité et de droit -Rudiments de programmation et de shell. -Connaissances basiques du fonctionnement et de l'utilisation d'un ordinateur. -Utilisation courante d'Internet.

**Libellé de l'UE : Anglais****Filière :** Chimie**Spécialité :** Chimie Théorique et Computationnelle**Semestre :** S 1

Répartition du volume horaire global de l'UE et de ses matières	Cours : 22 h 30 TD : 22 h 30 TP: Travail personnel :
Crédits et coefficients affectés à l'UE et à ses matières	UE : Transversale crédits : 02  Matière 1 : Anglais Crédits : 02 Coefficient : 02
Mode d'évaluation (continu ou examen)	continu et examen
Description des matières	<b>Anglais :</b> L'objectif de cet enseignement est de : - Consolider les bases linguistiques au moyen d'exercices structuraux - Développer les techniques orales à l'aide de documents audiovisuels traitant de questions scientifiques - Susciter l'esprit de synthèse dans la langue étrangère en prolongeant des discussions et débats sur des articles scientifiques.

**Libellé de l'UE : Modélisation des Propriétés Moléculaires****Filière :** Chimie**Spécialité :** Chimie Théorique et Computationnelle**Semestre :** S 2

Répartition du volume horaire global de l'UE et de ses matières	Cours : 22 h 30 TD : 22 h 30 TP: 30 h 00 Travail personnel :
Crédits et coefficients affectés à l'UE et à ses matières	UE : Fondamentale crédits : 08  Matière 1 : Modélisation des Propriétés Moléculaires Crédits : 08 Coefficient : 04
Mode d'évaluation (continu ou examen)	continu et examen
Description des matières	<b>Modélisation des Propriétés Moléculaires :</b> -Connaître et évaluer les conséquences, appliquer en termes de formalismes, faire le lien entre formalisme et physique du problème -Classer les différentes méthodes en termes de coût et de précision et savoir déterminer les paramètres qui définissent le coût d'une méthode.

**Libellé de l'UE : Chimie des Matériaux****Filière :** Chimie**Spécialité :** Chimie Théorique et Computationnelle**Semestre :** S 2

Répartition du volume horaire global de l'UE et de ses matières	Cours : 22 h 30 TD : 22 h 30 TP: 22 h 30 Travail personnel :
Crédits et coefficients affectés à l'UE et à ses matières	UE : Fondamentale crédits : 04  Matière 1 : Chimie des Matériaux Crédits : 04 Coefficient : 02
Mode d'évaluation (continu ou examen)	continu et examen
Description des matières	<b>Chimie des Matériaux:</b> - Acquérir des connaissances fondamentales sur la structure et les propriétés des matériaux

**Libellé de l'UE : Incertitudes, validation de méthodes, Chimiométrie****Filière :** Chimie**Spécialité :** Chimie Théorique et Computationnelle**Semestre :** S 2

Répartition du volume horaire global de l'UE et de ses matières	Cours : 22 h 30 TD : 22 h 30 TP: 22 h 30 Travail personnel :
Crédits et coefficients affectés à l'UE et à ses matières	UE : Fondamentale crédits : 06  Matière 1 : Incertitudes, validation de méthodes, Chimiométrie Crédits : 06 Coefficient : 03
Mode d'évaluation (continu ou examen)	continu et examen
Description des matières	<b>Incertitudes, validation de méthodes, Chimiométrie :</b> Initiation à la méthodologie de la recherche et l'utilisation des plans d'expériences ainsi que les traitements statistiques dédiés à la validation des méthodes d'analyse et à l'estimation de la robustesse des méthodes d'analyse.

**Libellé de l'UE : Spectroscopies et Chimie Théorique****Filière :** Chimie**Spécialité :** Chimie Théorique et Computationnelle**Semestre :** S 2

Répartition du volume horaire global de l'UE et de ses matières	Cours : 22 h 30 TD : 22 h 30 TP: 30 h 00 Travail personnel :
Crédits et coefficients affectés à l'UE et à ses matières	UE : Méthodologie crédits : 09  Matière 1 : Spectroscopies et Chimie Théorique Crédits : 09 Coefficient : 05
Mode d'évaluation (continu ou examen)	continu et examen
Description des matières	<b>Spectroscopies et Chimie Théorique:</b> - Acquérir les notions théoriques et pratiques de base en RMN et Spectrométrie de masse. - Pouvoir identifier une molécule organique à partir de diverses données spectroscopiques.

**Libellé de l'UE : Chimie du Vivant****Filière :** Chimie**Spécialité :** Chimie Théorique et Computationnelle**Semestre :** S 2

Répartition du volume horaire global de l'UE et de ses matières	Cours : 22 h 30 TD : 22 h 30 TP: Travail personnel :
Crédits et coefficients affectés à l'UE et à ses matières	UE : Découverte crédits : 01  Matière 1 : Chimie du Vivant Crédits : 01 Coefficient : 01
Mode d'évaluation (continu ou examen)	continu et examen
Description des matières	<b>Chimie du Vivant :</b> -Approfondir les connaissances à l'interface de la chimie et de la biologie

**Libellé de l'UE : Recherches et Analyses Bibliographiques : Outils et Supports****Filière :** Chimie**Spécialité :** Chimie Théorique et Computationnelle**Semestre :** S 2

Répartition du volume horaire global de l'UE et de ses matières	Cours : 22 h 30 TD : 22 h 30 TP: Travail personnel :
Crédits et coefficients affectés à l'UE et à ses matières	UE : Transversale crédits : 02  Matière 1 : Recherches et Analyses Bibliographiques: Outils et Supports Crédits : 02 Coefficient : 02
Mode d'évaluation (continu ou examen)	continu et examen
Description des matières	<b>Recherches et Analyses Bibliographiques : Outils et Supports:</b> - Optimiser les recherches bibliographiques

**Libellé de l'UE : Modélisation Moléculaire****Filière :** Chimie**Spécialité :** Chimie Théorique et Computationnelle**Semestre :** S 3

Répartition du volume horaire global de l'UE et de ses matières	Cours : 45 h 00 TD : 45 h 00 TP: 60 h 00 Travail personnel :
Crédits et coefficients affectés à l'UE et à ses matières	UE : Fondamentale crédits : 12  Matière 1 : Modélisation Moléculaire : Applications Crédits : 06 Coefficient : 03  Matière 2 : Dynamique Moléculaire et Calculs Monte-Carlo Crédits : 06 Coefficient : 03
Mode d'évaluation (continu ou examen)	continu et examen
Description des matières	<b>Modélisation Moléculaire : Applications</b> -Bonne connaissance dans le domaine de la modélisation moléculaire des systèmes biologique et des matériaux. -Maîtrise des outils de modélisation  <b>Dynamique Moléculaire et Calculs Monte-Carlo:</b> Comprendre les propriétés statistiques de la matière grâce à une analyse au niveau microscopique

**Libellé de l'UE : Thermodynamique Statistique****Filière :** Chimie**Spécialité :** Chimie Théorique et Computationnelle**Semestre :** S 3

Répartition du volume horaire global de l'UE et de ses matières	Cours : 22 h 30 TD : 22 h 30 TP: 22 h 30 Travail personnel :
Crédits et coefficients affectés à l'UE et à ses matières	UE : Fondamentale crédits : 06  Matière 1 : Thermodynamique Statistique Crédits : 06 Coefficient : 03
Mode d'évaluation (continu ou examen)	continu et examen
Description des matières	<b>Thermodynamique Statistique:</b> -Consolider les acquis de la thermodynamique classique et apporter une connaissance solide sur la thermodynamique statistiques et ses applications.

**Libellé de l'UE : Chimométrie et Modélisation Moléculaire****Filière :** Chimie**Spécialité :** Chimie Théorique et Computationnelle**Semestre :** S 3

Répartition du volume horaire global de l'UE et de ses matières	Cours : 22 h 30 TD : 22 h 30 TP: 22 h 30 Travail personnel :
Crédits et coefficients affectés à l'UE et à ses matières	UE : Méthodologie crédits : 09  Matière 1 : Chimométrie et Modélisation Moléculaire Crédits : 09 Coefficient : 05
Mode d'évaluation (continu ou examen)	continu et examen
Description des matières	<b>Chimométrie et Modélisation Moléculaire:</b> - Approfondir l'utilisation des grandes méthodes de chimie quantiques et classiques ainsi que les méthodes de chimométrie.

**Libellé de l'UE : Drug Design****Filière :** Chimie**Spécialité :** Chimie Théorique et Computationnelle**Semestre :** S 3

Répartition du volume horaire global de l'UE et de ses matières	Cours : 22 h 30 TD : 22 h 30 TP: Travail personnel :
Crédits et coefficients affectés à l'UE et à ses matières	UE : Découverte crédits : 01  Matière 1 : Drug Design Crédits : 01 Coefficient : 01
Mode d'évaluation (continu ou examen)	continu et examen
Description des matières	<b>Drug Design :</b> - Vision globale du processus de développement d'un médicament dans l'industrie pharmaceutique. - Compréhension du lien entre la reconnaissance moléculaire et l'activité biologique. (Interface chimie-biologie)

**Libellé de l'UE : Logiciels et Bases de Données en Chimie****Filière :** Chimie**Spécialité :** Chimie Théorique et Computationnelle**Semestre :** S 3

Répartition du volume horaire global de l'UE et de ses matières	Cours : 22 h 30 TD : 22 h 30 TP: Travail personnel :
Crédits et coefficients affectés à l'UE et à ses matières	UE : Transversale crédits : 02  Matière 1 : Logiciels et Bases de Données en Chimie Crédits : 02 Coefficient : 02
Mode d'évaluation (continu ou examen)	continu et examen
Description des matières	<b>Logiciels et Bases de Données en Chimie :</b> -Connaitre et maitriser l'utilisation de logiciels et bases de données indispensable pour satisfaire les besoins des chercheurs et des laboratoires pour résoudre des problèmes de plus en plus complexes

## **IV - Programme détaillé par matière**

(1 fiche détaillée par matière)

## FICHE 1

### Matière : Atomistique et Liaison Chimique

#### Intitulé du Master : Chimie Théorique et Computationnelle

Semestre : S1

Enseignant responsable de l'UE : *Dr. NEMICHE Nardjesse*

Enseignant responsable de la matière: *Dr. NEMICHE Nardjesse*

#### Objectifs de l'enseignement

- Maîtriser les concepts essentiels de la chimie théorique utiles pour la description des structures moléculaires, de leurs propriétés et de leur réactivité.
- Comprendre les enjeux actuels de la chimie théorique.

#### Connaissances préalables recommandées

L'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du tronc commun de la licence.

#### Contenu de la matière :

1. Notions de mécanique quantique
2. Atome d'hydrogène
3. Atomes à plusieurs électrons
4. Fonctions d'onde moléculaires – Méthode de Hückel généralisée - Molécules diatomiques
5. Symétrie moléculaire – Eléments de théorie des groupes de symétrie
6. Molécules du type AH<sub>n</sub>
7. Molécules conjuguées - Méthode de Hückel simple
8. Les orbitales et la réactivité chimique

**Mode d'évaluation** : continu et examen

#### Références :

- Jean, Y. ; Volatron, F. Atomistique et liaison chimique, Ediscience Int., 1995.
- Guymont, M. Structure de la matière. Atomes, liaisons chimiques et cristallographie, Belin, 2003.
- Rivail, J.-L. Eléments de chimie quantique à l'usage des chimistes, Paris : InterEd : Ed. du CNRS, 1994.

## FICHE 2

**Matière : Mathématiques Appliquées à la Chimie**

**Intitulé du Master : Chimie Théorique et Computationnelle**

**Semestre : S1**

**Enseignant responsable de l'UE : Mr SAYAD Nasreddine**

**Enseignant responsable de la matière: Mr SAYAD Nasreddine**

### **Objectifs de l'enseignement**

- Rappeler les notions mathématiques de bases
- Simplifier considérablement le développement de la chimie théorique

### **Connaissances préalables recommandées**

L'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du tronc commun de la licence.

### **Contenu de la matière :**

Cet enseignement de Mathématique est structuré en 5 grandes parties :

1. Variables complexes
2. Equations différentielles
3. Analyse dans  $\mathbb{R}^n$
4. Algèbre linéaire
5. Analyse de Fourier.

**Mode d'évaluation :** continu et examen

### **Références :**

-Cances E. ; Le Bris C. ; Maday Y. Méthodes mathématiques en chimie quantique. Une introduction. Springer, 2006.

**FICHE 3**  
**Matière: Chimie Organique**

**Intitulé du Master : Chimie Théorique et Computationnelle**

**Semestre : S1**

**Enseignant responsable de l'UE : Pr. ALI-OTHMANE Adil**

**Enseignant responsable de la matière: Pr. ALI-OTHMANE Adil**

**Objectifs de l'enseignement**

- Maîtriser divers fondamentaux et concepts en chimie organique.
- Maîtriser des notions de réactivités et sélectivités intrinsèques.
- Comprendre les enjeux actuels de la chimie organique contemporaine.

**Connaissances préalables recommandées**

L'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du tronc commun de la licence.

**Contenu de la matière :**

- Grands types de réactifs, réactions et intermédiaires réactionnels en chimie organique : approches mécanistique et orbitale.
- Acidité des composés organiques
- Oxydation et réduction des composés organiques
- Maîtrise de la transformation chimique : contrôle cinétique/contrôle thermodynamique.

**Mode d'évaluation :** continu et examen

**Références :**

- Hornby M. ; Peach J. Les fondements de la chimie organique. De boeck, 1997.
- Carey F. A. ; Sundberg R. J. Chimie organique avancée: Structures moléculaires et mécanismes réactionnels. De boeck, 1996.
- McMurry J. Organic Chemistry. Cengage Learning, 2012.

## FICHE 4

### Matière: Chimie Bio-organique et Produits naturels

#### Intitulé du Master : Chimie Théorique et Computationnelle

Semestre : S1

Enseignant responsable de l'UE : *Pr. ALI-OTHMANE Adil*

Enseignant responsable de la matière: *Mlle AMARA Sarah*

#### Objectifs de l'enseignement

-Apporter une connaissance solide sur la synthèse chimique des molécules bio-organiques.

#### Connaissances préalables recommandées

L'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du tronc commun de la licence.

#### Contenu de la matière :

-Produits Naturels :

- Oses, osides et polyosides : structure, réactivité, protection/déprotection et activation sélectives, synthèse glycosidique et substitutions sélectives...
- Acides aminés et peptides : structures et propriétés, synthèses par voie asymétrique et catalyse énantiosélective. ...
- Dérivés d'acides gras (réactivité chimique, propriétés physico-chimiques...), terpènes (structure et biosynthèse), stéroïdes (structure et fonction biologique).

-Ligation Chimique :

- Synthèse de protéines et Synthèse par combinaison de stratégies (chimiques et biologie moléculaire)
- Autres stratégies de ligation, la réaction de Staudinger. Applications et fonctionnalisation de surfaces

**Mode d'évaluation** : continu et examen

#### Références :

- Santelli M. Chimie bio-organique. Lavoisier, 2012.
- Dugas ; Hermann. Introduction à la chimie bio-organique : de la molécule à la supramolécule jusqu'aux biomolécules. Librairie de l'Université de Montréal, 2000.
- McMurry J. ; Begley T. ;Chimie organique des processus biologiques. De Boeck Supérieur, 2006.

**FICHE 5**  
**Matière : Cristallochimie**

**Intitulé du Master : Chimie Théorique et Computationnelle**

**Semestre : S1**

**Enseignant responsable de l'UE : Pr. BEKKA Ahmed**

**Enseignant responsable de la matière: Pr. BEKKA Ahmed**

**Objectifs de l'enseignement**

-Acquérir les notions nécessaires à la description de la structure atomique des milieux matériels cristaux et molécules pour la compréhension raisonnée des phénomènes de la physique et de la chimie.

**Connaissances préalables recommandées**

L'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du tronc commun de la licence.

**Contenu de la matière :**

- Géométrie cristalline (maille, systèmes cristallins...)
- Radiocristallographie et loi de BRAGG
- Divers types de solides cristallisés (métallique, ionique, covalent, moléculaire)
- Energétique de l'état cristallin
- Défauts cristallins et non-stoechiométrie
- Diffraction des rayons X, cristallogénèse, relations structure-propriété.

**Mode d'évaluation :** continu et examen

**Références :**

- Schwarzenbach D. ; Chapuis G. Cristallographie, Presses polytechniques et universitaires romandes, 2006.
- Rousseau J. J. ; Gibaud . Cristallographie géométrique et radiocristallographie, Sciences sup, Dunod, 2007.

**FICHE 6**  
**Matière: Techniques d'analyses chimiques**

**Intitulé du Master : Chimie Théorique et Computationnelle**

**Semestre : S1**

**Enseignant responsable de l'UE : Pr. TCHOUAR Noureddine**

**Enseignant responsable de la matière: Pr. TCHOUAR Noureddine**

**Objectifs de l'enseignement**

- Compétence sur l'utilisation raisonnée d'un ensemble de techniques d'analyses chimiques pour aboutir à la résolution de structure moléculaires et à la caractérisation de matériaux.
- Connaissance des principes fondamentaux et des appareillages à mettre en œuvre.
- Maîtriser l'exploitation qualitative et quantitative des analyses.

**Connaissances préalables recommandées**

A minima, l'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du tronc commun de la licence.

**Contenu de la matière :**

**1. Résolution de structures moléculaires**

- Résonance magnétique nucléaire 1D et 2D : Principes fondamentaux. Instrumentation. RMN 2D, corrélations homonucléaires et hétéronucléaires. RMN des solides (MAS).
- Spectrométrie de Masse : Techniques d'ionisation, techniques de désorption-ionisation et désolvatation-ionisation). Instrumentation. Etude des mécanismes de fragmentation.
- Méthodes chromatographiques avancées : Rappels sur les méthodes de base, récents développement, chromatographie ultra-rapide, couplages GC-MS, chromatographie 2D.
- Méthodes optiques : spectroscopies Infra-rouge et UV-visible, absorption atomique.
- Résolution structurale moléculaire

**2. Caractérisation de matériaux par Analyses thermiques**

- Concepts et outils, Méthodes différentielles (ATD, DSC, AED modulée, microcalorimétrie).
- Analyse thermogravimétrique, ATD-ATG, analyse des gaz émanants (IR, SM, chromatographie). Aspects cinétiques.
- Analyse thermomécanique, dilatométrie, Analyse dynamique modulée.

**Mode d'évaluation :** continu et examen

**Références :**

-Skoog, D.A., Holler, F.J., Nieman, T.A., Principes d'analyse instrumentale, De Boeck, 2003

## **FICHE 7**

### **Matière: Système d'Exploitation et Scripts**

**Intitulé du Master : Chimie Théorique et Computationnelle**

**Semestre : S1**

**Enseignant responsable de l'UE : Mr SAYAD Nasreddine**

**Enseignant responsable de la matière: Mr SAYAD Nasreddine**

#### **Objectifs de l'enseignement**

Les objectifs de cet enseignement est maîtrise des éléments matériels et logiciels d'un PC, connaître l'environnement graphique et des systèmes d'exploitation, les rudiments de programmation et de shell et permettre une utilisation courante d'Internet.

#### **Connaissances préalables recommandées**

A minima, l'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du tronc commun de la licence.

#### **Contenu de la matière :**

- Utilisation et configuration des systèmes.
- Administration Linux, Unix et MS Windows.
- Shell scripts.
- Matériels d'interconnexion.
- Réseaux TCP/IP (DNS, Mail, Web).
- Sécurité.
- Principes des systèmes d'exploitation, architectures des systèmes, utilisations et configurations des systèmes, administration simple, interfaces de commandes (shells) et scripts d'automatisation, réseaux locaux, TCP/IP, matériels d'interconnexion et bases de sécurité informatique.

**Mode d'évaluation :** continu et examen

#### **Références :**

- Tanenbaum A. S. Systèmes d'exploitation: systèmes centralisés, systèmes distribués. Dunod, 1999.
- Rohaut S. Programmation shell sous Unix-Linux: sh (Bourne), ksh, bash. Editions ENI, 2009.
- Bertrand D. ; Dufour E. Linux: Maîtrisez l'administration du système. Editions ENI, 2009.

## **FICHE 8**

### **Matière : Anglais**

**Intitulé du Master : Chimie Théorique et Computationnelle**

**Semestre : S1**

**Enseignant responsable de l'UE : Pr. ALI-OTHMANE Adil**

**Enseignant responsable de la matière: Pr. ALI-OTHMANE Adil**

#### **Objectifs de l'enseignement**

L'objectif de cet enseignement est de consolider les bases linguistiques, de développer les techniques orales à l'aide de documents audiovisuels traitant de thèmes scientifiques et de susciter l'esprit de synthèse dans la langue anglaise.

#### **Connaissances préalables recommandées**

A minima, l'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du tronc commun de la licence et des classes terminales des lycées.

#### **Contenu de la matière :**

Les cours d'anglais sont axés sur l'expression et la compréhension orales, ainsi que l'acquisition des automatismes qui facilitent la compréhension et la rédaction écrites.

L'enseignement proposé s'appuie sur des documents à la fois écrits et oraux afin de travailler toutes les compétences :

-Compréhension de l'écrit avec des articles scientifiques de vulgarisation : Compréhension des documents scientifiques utilisés quotidiennement par les chimistes (publications, brevets, protocoles expérimentaux, fiches techniques, organisation de colloques, vulgarisation de la chimie,...). Le vocabulaire spécifique aux équipements et matériel du laboratoire, aux descriptions de protocoles expérimentaux, ainsi que celui des consignes de sécurité au Laboratoire sera étudié.

-Compréhension de l'oral : grâce à des enregistrements portant également sur des thématiques scientifiques.

-Travailler l'expression orale : en prolongeant des discussions et débats sur des articles scientifiques.

**Mode d'évaluation :** continu et examen

## FICHE 9

### Matière : Modélisation des Propriétés Moléculaires

#### Intitulé du Master : Chimie Théorique et Computationnelle

Semestre : S2

Enseignant responsable de l'UE : *Melle AMARA Sarah*

Enseignant responsable de la matière: *Melle AMARA Sarah*

#### Objectifs de l'enseignement

-Connaître et évaluer les conséquences, appliquer en termes de formalismes, faire le lien entre formalisme et physique du problème, mais aussi classer les différentes méthodes en termes de coût et de précision et savoir déterminer les paramètres qui définissent le coût d'une méthode.

#### Connaissances préalables recommandées

A minima, l'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du tronc commun de la licence et du premier semestre du M1.

#### Contenu de la matière :

Partie 1 : Hartree-Fock :

Approximations fondamentales de la chimie quantique

Principes Généraux de la méthode Hartree-Fock

Machinerie associée à la méthode HF

Aspects Pratiques

Partie 2 : Théorie de la Fonctionnelle de la Densité

Théorèmes fondamentaux de la DFT

Formalisme de Kohn-Sham

DFT dépendant du temps

Partie 3 : Méthodes Post Hartree-Fock

Théorie des perturbations

Approche variationnelle

Coupled Cluster

Performances et Coût

Rupture de liaison

Spectroscopie théorique (vibration, électronique)

Méthodes hybrides et nouvelles.

**Mode d'évaluation** : continu et examen

#### Références :

- Jean, Y. ; Volatron, F. Structure électronique des molécules, tomes 1-2, Edisciences Int. 1994.

- Chaquin, P. Manuel de Chimie théorique : application à la structure et à la réactivité en chimie moléculaire, Ellipses, 2000.

**FICHE 10**  
**Matière : Chimie des Matériaux**

**Intitulé du Master : Chimie Théorique et Computationnelle**

**Semestre : S2**

**Enseignant responsable de l'UE : Pr. KACIMI Larbi**

**Enseignant responsable de la matière: Pr. KACIMI Larbi**

**Objectifs de l'enseignement**

- Acquérir des connaissances fondamentales sur la structure et les propriétés des matériaux.

**Connaissances préalables recommandées**

A minima, l'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du tronc commun de la licence.

**Contenu de la matière :**

Le solide, ses caractéristiques et ses fonctionnalités :

- Description élémentaire de leurs structures (notions de cristal parfait et de cristal réel et de structure amorphe et diffractions des rayons X),
- Relation entre propriétés structurales et propriétés macroscopiques (électriques, magnétiques, optiques et chimiques) et applications (notion de matériau: céramiques, semi-conducteurs, aimants, piézoélectriques).

Les notions de surface, d'interface, de porosité et de catalyseur hétérogène.

Introduction à quelques techniques spécifiques aux solides.

**Mode d'évaluation** : continu et examen

**Références :**

- Mercier J. P. ; Kurz W. ; Zambelli G. Introduction à la science des matériaux, Presses Polytechniques et Universitaires Romandes, 1999.
- Landolt D. Corrosion et chimie de surfaces des métaux, Presses Polytechniques et Universitaires Romandes, 1997.

## FICHE 11

**Matière : Incertitudes, validation de méthodes, Chimiométrie**

**Intitulé du Master : Chimie Théorique et Computationnelle**

**Semestre : S2**

**Enseignant responsable de l'UE : Dr. BENOUALI Djillali**

**Enseignant responsable de la matière: Dr. BENOUALI Djillali**

### **Objectifs de l'enseignement**

Initiation à la méthodologie de la recherche et l'utilisation des plans d'expériences ainsi que les traitements statistiques dédiés à la validation des méthodes d'analyse et à l'estimation de la robustesse des méthodes d'analyse.

### **Connaissances préalables recommandées**

L'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du tronc commun de la licence.

### **Contenu de la matière :**

1. Les protocoles statistiques de validation des méthodes.
2. Critères de validation et description et conséquences des plans expérimentaux de validation.
4. Calculs statistiques de validation des méthodes d'analyse.
5. Notion d'incertitude de mesure.
6. Applications : validation de méthodes d'analyse (dans les cas de l'analyse de traces, de produits manufacturés, de produits naturels).

**Mode d'évaluation :** continu et examen

### **Références :**

- J. Goupy, Introduction aux Plans d'Expériences, édition Dunod , 2013.
- M. Feinberg, Labo-Stat : guide validation des méthodes d'analyse , édition Lavoisier Tec&Doc, 2009.

## FICHE 12

### Matière : Spectroscopies et Chimie Théorique

#### Intitulé du Master : Chimie Théorique et Computationnelle

Semestre : S2

Enseignant responsable de l'UE : *Mme HAMOU Zakia*

Enseignant responsable de la matière: *Mme HAMOU Zakia*

#### Objectifs de l'enseignement

- Acquérir les notions théoriques et pratiques de base en RMN et Spectrométrie de masse.
- Pouvoir identifier une molécule organique à partir de diverses données spectroscopiques.

#### Connaissances préalables recommandées

L'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du tronc commun de la licence.

#### Contenu de la matière :

Spectroscopie RMN :

-Postulats et principes : moment magnétique, moment cinétique. Spectroscopie de RMN. Énergies mises en jeu.

-Mouvement d'un moment dans un champ, fréquence de Larmor. Aspect macroscopique. Excitation impulsionnelle.

-Signal RMN brut. Instrumentation. Traitement de données. Transformation de Fourier. Filtrages.

-Interactions RMN. L'écran électronique. Ordre de grandeur Unité de mesure. Le ppm. Tableau de déplacement chimique.

-Interactions RMN. Les couplages dipolaire, scalaire et quadripolaire. Effets de ces couplages au premier ordre. Interactions RMN. Calcul de spectre. L'hamiltonien de spin. Valeurs propres, vecteurs propres et probabilités de transition.

**Mode d'évaluation** : continu et examen

#### Références :

- Russell D. H. Experimental Mass Spectrometry, Springer, 1994.
- Landolt D. Résonance magnétique nucléaire appliquée à l'analyse structurale de composés organiques, Publications université de Rouen, 1999.

**FICHE 13**  
**Matière : Chimie du Vivant**

**Intitulé du Master : Chimie Théorique et Computationnelle**

**Semestre : S2**

**Enseignant responsable de l'UE : Mr OUADAH Karim**

**Enseignant responsable de la matière: Mr OUADAH Karim**

**Objectifs de l'enseignement**

-Approfondir les connaissances à l'interface de la chimie et de la biologie

**Connaissances préalables recommandées**

L'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du tronc commun de la licence.

**Contenu de la matière :**

- Aspects généraux de pharmacologie moléculaire, notions de récepteurs, mode d'action de quelques médicaments, procédures de mise sur le marché.
- Aspects biochimique de la transmission de l'information, cascades enzymatiques.
- Contrôle de l'expression et du transfert de gènes, notions de génétique moléculaire.
- Méthodes d'analyse des macromolécules par RMN multidimensionnelle, effet Overhauser, application à l'étude de macromolécules.
- Analyse des macromolécules par spectrométrie de masse, infrarouge, fluorescence, dichroïsme circulaire.
- Membranes cellulaires, et phospholipides, phénomènes d'auto-organisation cellulaire.

**Mode d'évaluation :** continu et examen

**Références :**

- Moulin M. ; Coquerel A. Pharmacologie, Elsevier Masson, 2002.
- Audigié C.; Zonszain F. Biochimie métabolique, Biosciences et techniques, 1993.

## FICHE 14

**Matière : Recherches et Analyses Bibliographiques : Outils et Supports**

**Intitulé du Master : Chimie Théorique et Computationnelle**

**Semestre : S2**

**Enseignant responsable de l'UE : *Mr BENTAYEB Kamel***

**Enseignant responsable de la matière: *Mr BENTAYEB Kamel***

### **Objectifs de l'enseignement**

- Optimiser les recherches bibliographiques

### **Connaissances préalables recommandées**

L'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du premier semestre du M1.

### **Contenu de la matière :**

-Moteurs de recherche, Journaux Scientifiques, Banques de données, anglais scientifique.  
-Critères de sélection des documents fiables  
-Notions de droit d'auteur

**Mode d'évaluation :** continu et examen

### **Références :**

-Guinchat C. ; Menou M. Introduction générale aux sciences et techniques de l'information et de la documentation .Deuxième édition revue et augmentée par Marie-France Blanquet. Paris : UNESCO, 1990.

## FICHE 15

### Matière : Modélisation Moléculaire : Applications

#### Intitulé du Master : Chimie Théorique et Computationnelle

Semestre : S3

Enseignant responsable de l'UE : *Pr. TCHOUAR Noureddine*

Enseignant responsable de la matière: *Mme MELLALI Fatima Zohra Niema*

#### Objectifs de l'enseignement

- Bonne connaissance dans le domaine de la modélisation moléculaire des systèmes biologique et des matériaux.
- Maîtrise des outils de modélisation

#### Connaissances préalables recommandées

L'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du premier et deuxième semestre du M1.

#### Contenu de la matière :

- Modélisation classique de la structure de systèmes de grande taille, description des interactions liantes en terme de potentiel effectif (champ de forces classiques), termes de Van der Waals et interactions électrostatiques, polarisation, transfert de charges ;
- Modélisation quantique : approximations fondamentales nécessaires à la résolution de l'équation de Schrödinger, méthodes ab initio, fonctionnelle de la densité. Initiation aux méthodes mixtes quantiques / classiques.
- Choix du système de calcul : Erreurs induites par un mauvais choix.

#### Applications thématiques

a – Étude de la structure et de la réactivité

Introduire les concepts fondamentaux de l'étude de la « structure et de la réactivité » en chimie moléculaire et dans les systèmes biologiques.

b – Propriétés des matériaux

Introduire les concepts fondamentaux de l'étude de la structure et des propriétés des matériaux.

**Mode d'évaluation** : continu et examen

#### Références :

- Debord J., Introduction à la modélisation moléculaire, 2004.
- Dugas H., Principes de base en modélisation moléculaire, Aspects théoriques et pratiques, Librairie de l'Université de Montréal, 1996.

## FICHE 16

**Matière : Dynamique Moléculaire et Calculs Monte-Carlo**

**Intitulé du Master : Chimie Théorique et Computationnelle**

**Semestre : S3**

**Enseignant responsable de l'UE : Pr. TCHOUAR Noureddine**

**Enseignant responsable de la matière: Pr. TCHOUAR Noureddine**

### **Objectifs de l'enseignement**

-Comprendre les propriétés statistiques de la matière grâce à une analyse au niveau microscopique

### **Connaissances préalables recommandées**

L'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du premier et deuxième semestre du M1.

### **Contenu de la matière :**

- Mécanique et dynamique moléculaires
- Dynamique Moléculaire classique
- Dynamique Moléculaire ab initio
- Calculs Monte-Carlo
- Application

**Mode d'évaluation :** continu et examen

### **Références :**

- Nightingale M. P. ; Umrigar C. J., Monte Carlo Methods in Chemistry, Wiley, NY, 1998.
- Frenkel, D.; Smit, B., Understanding molecular simulations: From algorithms to applications, Academic Press: San Diego, 1996.

**FICHE 17**  
**Matière : Thermodynamique Statistique**

**Intitulé du Master : Chimie Théorique et Computationnelle**

**Semestre : S3**

**Enseignant responsable de l'UE : Pr. OULD-KADDOUR Fouzia**

**Enseignant responsable de la matière: Pr. OULD-KADDOUR Fouzia**

**Objectifs de l'enseignement**

-Consolider les acquis de la thermodynamique classique et apporter une connaissance solide sur la thermodynamique statistiques et ses applications.

**Connaissances préalables recommandées**

L'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du premier et deuxième semestre du M1.

**Contenu de la matière :**

Introduction. Mécanique, thermodynamique macroscopique et thermodynamique statistique

- La notion d'ensemble statistique. L'ensemble canonique
- Autres ensembles, équivalences entre ensembles
- Application aux systèmes « dilués », statistique de Boltzmann
- La limite classique de la thermodynamique statistique
- Statistiques quantiques

La théorie des phases moléculaires condensées

- Fluides réels, théorie de van der Waals
- Transitions de phase, notion d'universalité

L'approche numérique de la thermodynamique statistique : introduction aux méthodes de simulation moléculaire

Les forces intermoléculaires en phase condensée

- Travaux Pratiques de simulations moléculaires

**Mode d'évaluation :** continu et examen

**Références :**

- Infelta P.; Graetzel M. Thermodynamique : principes et applications, Brown Walker Press, 2006.

## FICHE 18

**Matière : Chimiométrie et Modélisation Moléculaire**

**Intitulé du Master : Chimie Théorique et Computationnelle**

**Semestre : S3**

**Enseignant responsable de l'UE : Dr. BENOUALI Djillali**

**Enseignant responsable de la matière: Dr. BENOUALI Djillali**

### **Objectifs de l'enseignement**

- Approfondir l'utilisation des grandes méthodes de chimie quantiques et classiques ainsi que les méthodes de chimiométrie.

### **Connaissances préalables recommandées**

L'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du premier et deuxième semestre du M1.

### **Contenu de la matière :**

- Approche chimiométrique des résultats d'une analyse
- Choix et validation d'une méthode d'analyse
- Optimisation de la collecte des données
- Propriétés spectroscopiques ( électronique, vibration, RMN, ...)
- Réactivité chimique, systèmes catalytiques, liaison hydrogène, effet du solvant sur la conformation de soluté .

**Mode d'évaluation :** continu et examen

### **Références :**

- Goupy J., La méthode des plans d'expériences, Dunod, Paris, 1996.
- Lang-Michaut C. Pratique des tests statistiques : Interpretation des mesures, Dunod, Paris, 1990.

**FICHE 19**  
**Matière : Drug Design**

**Intitulé du Master : Chimie Théorique et Computationnelle**

**Semestre : S3**

**Enseignant responsable de l'UE : Pr. BELAIDI Salah**

**Enseignant responsable de la matière: Pr. BELAIDI Salah**

**Objectifs de l'enseignement**

- Vision globale du processus de développement d'un médicament dans l'industrie pharmaceutique et compréhension du lien entre la reconnaissance moléculaire et l'activité biologique. (Interface chimie-biologie)

**Connaissances préalables recommandées**

L'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du premier et deuxième semestre du M1.

**Contenu de la matière :**

- Analyse des interactions moléculaires (protéines-protéines, protéines-ADN, protéines-petites molécules) et conception in silico de molécules à visée thérapeutique.  
- Applications industrielles de la modélisation moléculaire des cibles. Optimisation de ligands par des méthodes quantiques et semi-empiriques. Relation quantitative structure-activité (QSAR, TSAR). Méthodes d'amarrage moléculaire. Criblage de chimiothèques. Conception de molécules à visée thérapeutique. Docking ligands/récepteurs

**Mode d'évaluation :** continu et examen

**Références :**

- Perun T. J.; Propst C.L. Computer-aided drug design : methods and applications, Marcel Dekker.

## FICHE 20

**Matière : Logiciels et Bases de Données en Chimie**

**Intitulé du Master : Chimie Théorique et Computationnelle**

**Semestre : S3**

**Enseignant responsable de l'UE : Mme NEKKAZ Karima**

**Enseignant responsable de la matière: Mme NEKKAZ Karima**

### **Objectifs de l'enseignement**

-Connaitre et maîtriser l'utilisation de logiciels et bases de données indispensable pour satisfaire les besoins des chercheurs et des laboratoires pour résoudre des problèmes de plus en plus complexes

### **Connaissances préalables recommandées**

L'étudiant doit s'appuyer sur les acquis du premier et deuxième semestre du M1.

### **Contenu de la matière :**

Utilisation de logiciels sur poste,  
Logiciels de TP,  
Logiciels de cours,  
Logiciels mixtes (TP / cours),  
Utilisation du partage d'information en réseau  
Acquisition de données

### **Bases de données**

-Données physico-chimiques (thermodynamiques, cinétiques),  
-Informations sur la sécurité, toxicité, précautions d'emplois,  
-Données spectroscopiques (IR, UV-Vis., RMN, SM),  
-Aide à la nomenclature, etc.

**Mode d'évaluation :** continu et examen

### **Références :**

- Perun T. J.; Propst C.L. Computer-aided drug design : methods and applications, Marcel Dekker.

## **VI – Curriculum Vitae des Coordonateurs**

## Curriculum Vitae du Pr. TCHOUAR Nouredine

### Eta civil :

**Nom et prénom :** TCHOUAR Nouredine

**Profession :** Enseignant-Chercheur / **Grade :** Professeur

**Adresse professionnelle :** Université des Sciences et de la Technologie d'Oran Mohamed Boudiaf, Faculté de Chimie, Département de Chimie Physique, BP.1505, El M'naouer, 31000, Oran, Algérie.

**E-mail :** [lamosi2002@yahoo.fr](mailto:lamosi2002@yahoo.fr) / [tchouar@univ-usto.dz](mailto:tchouar@univ-usto.dz)

**Tel :** 0554 97 85 72 **Fax :** 041 56 03 00

### Etudes et Diplômes

-1990 : Baccalauréat, Série Mathématiques, Lycée El-Haoues Sidi Bel-Abbés.

-1994 : D.E.S en Chimie-Physique, Université Djillali Liabès Sidi Bel Abbés.

-1998 : Magister en Chimie-Physique, Option Chimie Informatique, Université d'Oran Es- Senia.

-2005 : Doctorat en Sciences en Chimie, Option Génie Chimique, Université des Sciences et Technologies d'Oran (USTO).

-2008 : Habilitation Universitaire en Chimie Informatique, Université des Sciences et Technologies d'Oran (USTO).

### Domaines de compétences

**-Matières enseignées :** Chimie Générale, Thermodynamique, Chimie Physique, Modélisation et Simulation de la Matière Condensée.

**-Activités d'encadrement :** Chimie, Physique, Biologie, Biotechnologie, Informatique,

**-Domaines d'intérêt :** Informatique, Chimie Industrielle, Physique, Biologie, Biotechnologie

**-Thèmes de recherche :**

1- Simulation dans le domaine des équilibres de phases de mélanges par la méthode de dynamique moléculaire.

2- Modélisation et simulation des propriétés thermodynamiques des hydrates de gaz.

3- Calculs quantiques en méthodes de la fonctionnelle de la densité sur des systèmes mono et polynucléaires de métaux de transition.

4- Modélisation et Simulation des Macromolécules à intérêt Agronomique et Médical.

### Publications : articles, communications récentes :

- **Publications internationales :**

- **Revue et périodiques :**

**1- Auteurs :** N.Tchouar, M. Benyettou, F.Ould Kaddour

**Intitulé de l'article :** *Thermodynamic , Structural and transport Properties of Lennard-Jones Liquid Systems. A Molecular Dynamics Simulations of Liquid Helium, Neon, Methane and Nitrogen*

**ISSN 1422-0067**

**International Journal of Molecular Sciences 2003,4, 595-606**

**2- Auteurs :** N.Tchouar, F Ould Kadour, D. Levesque

**Intitulé de l'article:** *Computation of the properties of liquid neon, methane, and gas helium at low temperature by the Feynman-Hibbs approach.*

**Journal of Chemical Physics 2004, 15, 7326-7331.**

**3- Auteurs :** N.Tchouar, M. Benyettou, and F. Ould Kadour

**Intitulé de l'article:** *Quantum computation of the thermodynamics, structural and transport properties of Lennard-Jones Liquid Systems: The Feynman-Hibbs approach*

**Journal of Molecular liquids 2005, 122,69-73.**

**4- Auteurs** : N.Tchouar, M. Benyettou, and H. Baghli

**Intitulé de l'article**: A Reversible Algorithm for Nosé Molecular Dynamics Simulations. Equilibrium Properties of Liquid Methane

**Journal of Molecular liquids** 2007, 136, 5-10

**5- Auteurs** : Y. Liu, C. Lagrost, K. Costuas, **N. Tchouar**, H. Le Bozec and S. Rigaut

**Intitulé de l'article**: A multifunctional organometallic switch with carbon-rich ruthenium and diarylethene units.

**Chem. Commun.** 2008, 6117-6119.

**6- Auteurs** : N. Gauthier, **N. Tchouar**, F. Justaud, G. Argouarch, M. P. Cifuentes, L. Toupet, D. Touchard, J.-F. Halet, S. Rigaut, M. G. Humphrey, K. Costuas, F. Paul

**Intitulé de l'article**: Bonding and Electron Delocalization in Ru(III)  $\sigma$ -Arylacetylide Radicals [trans-CI( $\eta^2$ -dppe)<sub>2</sub>RuC $\equiv$ C(4-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>X)]<sup>+</sup> (X = NO<sub>2</sub>, C(O)H, C(O)Me, F, H, OMe, NMe<sub>2</sub>): Misleading Aspects of the ESR Anisotropy

**Organometallics**, 2009, 28 (7), 2253-2266.

**7- Auteurs** : C. Marrassini, A. Idrissi, I. De Waele, K. Smail, **N. Tchouar**, M. Moreau, A. Mezzetti

**Intitulé de l'article**: Organic solvent-luteolin interactions studied by FT-Raman, Vis-Raman, UV-Raman spectroscopy and DFT calculations

**Journal of Molecular Liquids**, 2014, 205.

**8- Auteurs** : Z. Almi, S. Belaidi, T. Lanez, **N. Tchouar**

**Intitulé de l'article**: Structure Activity Relationships, QSAR Modeling and Drug-like Calculations of TP Inhibition of 1,3,4-oxadiazoline-2-thione Derivatives

**ILCPA**, 2014, 18:113-122.

**9- Auteurs** : S. Amara, **N. Tchouar**

**Intitulé de l'article**: Computational Study of Some Double Headed Acyclo-C-Nucleosides.

**ILCPA**, 2014, 61:1-11.

**-Actes et Proceedings édités :**

**1- Auteurs** : **N. Tchouar**, M. Benyettou, S. Benyettou

**Intitulé de l'article**: Feynman-Hibbs quantum effective potentials for molecular dynamic simulations of liquid neon

**Intitulé du proceedings**: Third conference on the Foundations of Information Science. Paris July 4-7, 2005. FIS2005-Proceedings. **ISBN3-906980-17-0**.

<http://www.mdpi.org/fis2005/proceeding.html>. Published in 2005 by MDPI, Basel, Switzerland.

**2- Auteurs** **N. Tchouar**, F. Ould Kaddour, M. Benyettou.

**Intitulé de l'article**: Computation of the thermodynamic, structural and transport properties for liquid methane by isothermal-isobaric molecular dynamics

**Intitulé du proceedings**: Third conference on the Foundations of Information Science. Paris July 4-7, 2005. FIS2005-Proceedings. **ISBN3-906980-17-0**.

<http://www.mdpi.org/fis2005/proceeding.html>. Published in 2005 by MDPI, Basel, Switzerland

**-Publications nationales :**

**- Revues et périodiques :**

**1- Auteurs** : M.A. Slama, H. Hadi, S. Flazi, **N. Tchouar**

**Intitulé de l'article**: Etude du dépôt de pollution responsable du contournement des isolateurs des lignes aériennes du réseau électrique THT national.

**Sciences & Technologie B – N°25, Juin 2007, 43-50.**

## Responsabilités accomplies :

### *Scientifiques :*

- 1// Membre de l'équipe de recherche intitulée : Dynamique moléculaire en 3 D des systèmes complexes. *Projet agréé en 2005 pour 3 années code : B\*3102/01/05.*
- 2// Membre de l'équipe de recherche intitulée : **Algorithmes adaptés à la simulation numérique de dynamique moléculaire : Conception des interfaces graphiques.** *Projet agréé en 2007 pour 3 années code : B\*01920070019.*
- 3// Membre de l'équipe de recherche intitulée : **Conception des logiciels de modélisation et simulation des systèmes pétroliers.** *Projet agréé en 2007 pour 3 années code : B\*01920070048.*
- 4// Chef de l'équipe de recherche intitulée : **Modélisation et Simulation des Macromolécules à intérêt Agronomique et Médical.** *Projet agréé en 2010 pour 3 années code : B\*01920090043.*
- 5// **Responsable de la Post - Graduation** Cytochimie, Structure et Modélisation et Simulation des Macromolécules à intérêt Agronomique et Médical *de 2009 à 2012.*
- 6// **Actuellement** : Membre et chef de l'équipe du laboratoire de recherche de **Modélisation et d'Optimisation des systèmes Industriels –LAMOSI** Par arrêté n°197 de 2001.
- 7// Membre de l'équipe de recherche PNR Sciences Fondamentales intitulée : **Théorie des propriétés physiques des fluides denses.** *Projet agréé en septembre 2011 à l'université de Tlemcen.*
- 8// Chef de l'équipe de recherche intitulée : **Simulation des Systèmes Biologiques : Tester Intensivement des Molécules d'intérêt Pharmaceutique.** *Projet agréé en 2013 pour 3 années code : F01920120044*
- 9// Président du congrès : **10èmes Journées de Chimie Théorique et Computationnelle - JCTC10 Oran, 18-20 novembre 2012**
- 10// Vice Président du congrès : **Journées scientifiques de l'ingénierie du risque JSIR 2014, Oran, Algérie, les 08 et 09 Novembre 2014.**

### *Administratives :*

- 2006 Directeur Adjoint et Responsable de la Post-Graduation du Département de Chimie U.S.T.O.
- 2008 Directeur Adjoint et Responsable de la Post-Graduation et la Recherche Scientifique du Département Biotechnologie U.S.T.O. jusqu'au 01 décembre 2011.
- 2008 Membre du Comité Scientifique du Département de Biotechnologie, U.S.T.O jusqu'au 20 juillet 2013.
- 2010 Membre du Conseil Scientifique de la Faculté des Sciences, U.S.T.O Par arrêté n° 663 de 2010 jusqu'au 20 juillet 2013.
- 2011 Vice doyen de la Post-Graduation et la Recherche Scientifique et les Relations Extérieures de la Faculté des Sciences, U.S.T.O du 04 décembre 2011 jusqu'au 15 octobre 2012.
- 2012 Membre de la commission paritaire des corps des professeurs et maîtres de conférences depuis le 25 juin 2012 jusqu'à ce jour.
- 2012 Doyen de la Faculté des Sciences, U.S.T.O du 15 octobre 2012 jusqu'au 20 juillet 2013.
- 2012 Responsable du Centre des Concours et Examens de la Fonction Publique se déroulant à la Faculté des Sciences, U.S.T.O du 03 décembre 2012 jusqu'au 20 juillet 2013.
- 2013 Doyen de la Faculté de Chimie, U.S.T.O depuis le 20 juillet 2013 jusqu'au 03 juillet 2016.
- 2013 Membre du Comité Scientifique du Département de Chimie-Physique de la Faculté de Chimie, U.S.T.O depuis le 22/10/2013 jusqu'à ce jour.

## VII - Avis et Visas des organes administratifs et consultatifs

Intitulé du Master :

<b>Comité Scientifique de département</b>
Avis et visa du Comité Scientifique :  Date :
<b>Conseil Scientifique de la Faculté (ou de l'institut)</b>
Avis et visa du Conseil Scientifique :  Date :
<b>Doyen de la faculté (ou Directeur d'institut)</b>
Avis et visa du Doyen ou du Directeur :  Date :
<b>Conseil Scientifique de l'Université (ou du Centre Universitaire)</b>
Avis et visa du Conseil Scientifique :  Date :

## **VIII - Visa de la Conférence Régionale**

(Uniquement à renseigner dans la version finale de l'offre de formation)