

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

نموذج مطابقة و مواءمة

عرض تكوين ماستر أكاديمي
2025 – 2026

التخصص	الشعبة	ميدان
كيمياء المواد	الكيمياء	علوم المادة

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET
POPULAIRE**

**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

**Canevas de mise en conformité et
harmonisation**

OFFRE DE FORMATION

L.M.D. MASTER ACADEMIQUE

2025 – 2026

Domaine	Filière	Spécialité
SCIENCES DE LA MATIERE	CHIMIE	CHIMIE DES MATERIAUX

**I – Fiche d’organisation semestrielle des enseignements
(S1, S2 et S3)**

Semestre 1 :

Unité d'Enseignement	Matières	VHS	V.H hebdomadaire			Autres	Coeff	Crédits	Mode d'évaluation	
	Intitulé	15 Semaines	C	TD	TP				Continu	Examen
UE Fondamental Code : UEF 1 Crédits : 18 Coefficient : 9	Chimie du Solide	67h30	3h00	1h30		82h30	3	6	33%	67%
	Diagramme des phases du solide	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
	Méthodes d'élaboration des matériaux 1	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
	Techniques de caractérisation des matériaux 1	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
UE Méthodologie Code : UEM 1 Crédits : 9 Coefficient : 5	TP Méthodes d'élaboration des matériaux 1	22h30			1h30	27h30	1	2	50%	50%
	TP Caractérisation des Matériaux 1	22h30			1h30	27h30	1	2	50%	50%
	Intelligence artificielle et Machine Learning 1	15h00			1h00	10h00	1	1	50%	50%
	Propriétés physicochimiques des matériaux	45h00	1h30		1h30	55h00	2	4	50%	50%
UE Découverte Code : UED 1 Crédits : 2 Coefficient : 2	Nanosciences et Nanotechnologie	22h30	1h30			02h30	1	1		100%
	Méthodes thermiques d'analyse	22h30	1h30			02h30	1	1		100%
UE Transversal Code : UET 1 Crédits : 1 Coefficient : 1	Durabilité, vieillissement et recyclage des matériaux	22h30	1h30			02h30	1	1		100%
Total Semestre 1		375h	13h30	6h00	5h30	375h	17	30		

Semestre 2 :

Unité d'Enseignement	Matières	VHS	V.H hebdomadaire			Autres	Coeff	Crédits	Mode d'évaluation	
	Intitulé	15 Semaines	C	TD	TP				Continu	Examen
UE Fondamental Code : UEF 2 Crédits : 18 Coefficient : 9	Electrochimie Appliquée aux Matériaux	67h30	3h00	1h30		82h30	3	6	33%	67%
	Méthodes d'élaboration des matériaux 2	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
	Matériaux fonctionnels	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
	Techniques de caractérisation des matériaux 2	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
UE Méthodologie Code : UEM 2 Crédits : 9 Coefficient : 5	TP Méthodes spectroscopiques	22h30			1h30	27h30	1	2	50%	50%
	Modélisation des Matériaux	22h30	1h30			27h30	1	2		100%
	Chimimétrie, Analyse des Données statistique et plans d'expériences	45h00	1h30		1h30	55h00	2	4	50%	50%
	Intelligence artificielle et Machine Learning 2	15h00			1h00	10h00	1	1	50%	50%
UE Découverte Code : UED 2 Crédits : 2 Coefficient : 2	Semi-conducteurs et Applications technologiques	22h30	1h30			02h30	1	1		100%
	Matériaux polluants émergents	22h30	1h30			02h30	1	1		100%
UE Transversal Code : UET 2 Crédits : 1 Coefficient : 1	Choix des Matériaux	22h30	1h30			02h30	1	1		100%
Total Semestre 2		375h	15h00	6h00	4h00	375h	17	30		

Semestre 3 :

Unité d'Enseignement	Matières	VHS	V.H hebdomadaire			Autres	Coeff	Crédits	Mode d'évaluation	
	Intitulé	15 Semaines	C	TD	TP				Continu	Examen
UE Fondamental Code : UEF 3 Crédits : 18 Coefficient : 9	Chimie Physique des Surfaces et Interfaces	67h30	3h00	1h30		82h30	3	6	33%	67%
	Applications des supramolécules à l'état solide	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
	Nanomatériaux pour le Développement Durable	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
	Croissance cristalline	45h00	1h30	1h30		55h00	2	4	33%	67%
UE Méthodologie Code : UEM 3 Crédits : 9 Coefficient : 5	TP Modélisation des Matériaux	45h00			3h00	55h00	2	4	50%	50%
	Exploration de logiciels libres et open source de la spécialité	15h00			1h00	10h00	1	1	50%	50%
	TP Elaboration des Matériaux 2	22h30			1h30	27h30	1	2	50%	50%
	TP Caractérisation des Matériaux 2	22h30			1h30	27h30	1	2	50%	50%
UE Découverte Code : UED 3 Crédits : 2 Coefficient : 2	Capteurs et supercondensateurs électrochimiques	45h00	1h30	1h30		05h00	2	2	33%	67 %
UE Transversal Code : UET 3 Crédits : 1 Coefficient : 1	Entrepreneuriat, Innovation et Startup	22h30	1h30			2h30	1	1		100%
Total Semestre 3		375h	10h30	7h30	7h00	375h	17	30		

II - Programme détaillé par matière

(1 fiche détaillée par matière)

Adapter le programme des cours et travaux dirigés (TD) en fonction du volume horaire hebdomadaire présentiel (VHH présentiel) et du volume horaire hebdomadaire personnel (VHH personnel).

Programme détaillé par matière du semestre S1

Semestre : 1

UE : Fondamentale

Matière : Chimie du Solide

Objectifs de l'enseignement

L'objectif de cet enseignement est de permettre à l'étudiant de prendre connaissance des différentes classes de matériaux solides et de leurs principaux domaines d'application. Son objectif est également de délivrer les connaissances fondamentales et indispensables à la compréhension et à l'étude des propriétés des matériaux solides.

Connaissances préalables recommandées

Programme licence chimie

Contenu de la matière :

1. Introduction (Durée suggérée : 2 semaines)

- Les différents types de liaisons dans les solides (covalente, ionique, métallique, intermoléculaires)
- Solides amorphes, cristallins, semi-cristallins
- Propriétés générales des solides et classification des solides
 - Solutions solides de substitution primaire
 - Solutions solides de substitution secondaire ou intermédiaires
 - Solutions solides d'insertion
 - Composés définis

2. Défauts ponctuels dans les solides stœchiométriques (Durée suggérée : 3 semaines)

- Défauts intrinsèques
 - Défauts neutres et charges. Charge effective
 - Règles pour écrire les réactions de défauts
 - Nécessité thermodynamique des défauts et équilibre de défauts
 - Potentiel chimique des défauts et loi d'action des masses, Unités de construction
- Potentiel chimique et activité des électrons

3. Défauts ponctuels dans les solides non-stœchiométriques (Durée suggérée : 2 semaines)

- Composés non-stœchiométriques
- Exemples d'oxydes non-stœchiométriques
- Défauts minoritaires

4. Substitutions dans les solides. Dopage (Durée suggérée : 2 semaines)

- Substitution par un élément de même valence
- Substitution par un cation de valence inférieure
- Substitution par un cation de valence supérieure

5. Energies de formation et d'ionisation des défauts. Défauts dans un diagramme de bandes (Durée suggérée : 2 semaines)

- Energie de formation des défauts
- Défauts dans un diagramme de bandes

6. Diffusion dans les oxydes (Durée suggérée : 2 semaines)

- Cinétique de diffusion

- La dépendance de coefficient de diffusion
- Relation entre mobilité et coefficient de diffusion
- Conductivité dans les oxydes

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- *J.-F. Marucco : Chimie des solides (EDP Sciences)*
- *L. Smart et E. Moore : Introduction à la chimie du solide (Masson)*
- *L. Smart and E. Moore: Solid State Chemistry: An Introduction (Chapman & Hall)*
- *A. R. West: Basic Solid-State Chemistry (Wiley)*
- *P. F. Weller: Solid State Chemistry and Physics*
- *Progress in Solid State Chemistry (Series): Harvard Reiss Editor*

Semestre : 1

UE : Fondamentale

Matière : Diagramme des Phases du Solide

Objectifs de l'enseignement

L'enseignement de cette matière permet à l'étudiant de comprendre les bases de la thermodynamique et de la cinétique formelle appliquées aux systèmes matériels. Il vise également à maîtriser les types de diagrammes binaires (solutions solides, eutectiques, péritectiques, etc.) et leurs règles d'interprétation. Enfin, il permet d'appliquer ces connaissances à des cas industriels comme la lecture du diagramme des bronzes et l'optimisation des traitements thermiques.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé les bases de thermodynamique chimique, notions de la chimie générale et physico-chimie des solutions (solutions idéales et réelles : activité, coefficient d'activité), ainsi que les notions sur les alliages métalliques : solutions solides, composés intermédiaires ; définitions de base du point eutectique, péritectique...

Contenu de la matière :

1. Notions générales (2 semaines)

- Notion d'équilibre entre phases
- Règle ou loi des phases
- Règle des segments inverses
- Les écarts à l'équilibre
- Imprécisions sur les diagrammes
- Dénomination des phases

2. Les différents types de diagrammes binaires : cas de la diffusion parfaite dans le solide et dans le liquide (5 semaines)

- Cas des alliages formant des solutions solides illimitées
- Cas des alliages formant des solutions solides limitées
- Cas des alliages formant un eutectique
- Cas des alliages formant un eutectoïde
- Cas des alliages formant un péritectique
- Cas des alliages formant un péritectoïde
- Cas des alliages formant des phases intermédiaires
- Cas des alliages formant une lacune de miscibilité à l'état liquide
- Cas général des diagrammes d'équilibre

3. Cas pratique de la diffusion imparfaite : que deviennent les diagrammes d'équilibre ? (3 semaines)

- Cas du diagramme en fuseau
- Cas du diagramme eutectique

4. Applications des diagrammes d'équilibre (2 semaines)

- Introduction aux applications industrielles
- Utilisation dans la métallurgie et les traitements thermiques

5. Lecture du diagramme des bronzes (3 semaines)

- Identification des différentes transformations et phases intermédiaires
- Diagramme pratique des recuits industriels

- Diagramme pratique des alliages bruts de fonderie

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- Michel Soustelle : *Thermodynamique des matériaux* – École des Mines de Saint-Étienne (EDP Sciences), DOI:10.51926/ISTE.9781784051549
- Michel Dupeux : *Introduction à la science des matériaux* – Presses Polytechniques et Universitaires Romandes (PPUR)
- Robert W. Balluffi, Samuel M. Allen, W. Craig Carter : *Kinetics of Materials* – Wiley
- Jean-Noel Pons, Michel Robineau : *Thermodynamique et équilibres chimiques – Cours et exercices corrigés*
- Geneviève M.L. Dumas, Roger I. Ben-Aim : *L'indispensable sur les diagrammes de phases*
- C. Moreau, J.-P. Payen : *Thermodynamique chimique – exercices et problèmes corrigés*
- Alain Gruger : *Thermodynamique chimique – Travaux dirigés*
- A. Choukchou-Braham, M. Amine Didi : *Cinétique chimique et catalyse*

Semestre : 1

UE : Fondamentale

Matière : Méthode d'élaboration des matériaux 1

Objectifs de l'enseignement

L'enseignement de cette matière permet à l'étudiant de décrire les différents aspects d'élaboration de systèmes minéraux ou hybrides organo-minéraux. Il vise également à présenter leurs propriétés physico-chimiques ainsi que leurs applications dans les domaines des céramiques, des couches minces et des nanomatériaux.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé la thermodynamique des équilibres entre phases, le transfert de matière, le transfert de chaleur et la mécanique des fluides.

Contenu de la matière :

1. Introduction (1 semaine)

2. Réactions à l'état solide : Méthode céramique (3 semaines)

- Les réactifs
- Mélangeage / Broyage
- Traitement thermique
- Frittage : Détermination de la température de frittage
- Applications de la méthode céramique
- Inconvénients de la méthode céramique

3. Réactions en solution : Les méthodes de "chimie douce" (4 semaines)

- Co-précipitation d'hydroxydes
- Méthode sol-gel : Croissance minérale de la molécule au matériau, Matériaux hybrides
- Exemple d'application des matériaux hybrides
- Décomposition de complexes mixtes : La méthode Pechini

4. Méthodes hydrothermale (solvothermale) et par combustion (3 semaines)

- Définition
- Dispositif expérimental
- Avantages des méthodes
- Inconvénients des méthodes

5. La chimie des colloïdes (4 semaines)

- Enjeu des recherches sur les nanoparticules
- Principes de la synthèse colloïdale de nanoparticules
- Propriétés physiques des nanoparticules
- Exemples d'applications

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- *Éric Felder : Matériaux - de l'élaboration à l'utilisation des matériaux - caractéristiques, obtention, emplois – Collection Technosup, Éditeur Ellipses (2020)*
- *Jean-Marie Haussonne, James L. Barton, Paul Bowen, Claude Paul Carry : Céramiques et verres, Principes et techniques d'élaboration – Traité des matériaux, Vol. 16*
- *Jean-Jacques Rousseau et Alain Gibaud : Cristallographie géométrique et radiocristallographie*
- *Didier Rioux : Introduction à la cristallographie, solide cristallin et empilements compacts*

Semestre : 1

UE : UEF

Matière : Techniques de caractérisation de matériaux 1

Objectifs de l'enseignement

L'enseignement de cette matière permet à l'étudiant de décrire les différents aspects d'élaboration de systèmes minéraux ou hybrides organo-minéraux. Il vise également à présenter leurs propriétés physico-chimiques ainsi que leurs applications dans le domaine des céramiques, des couches minces et des nanomatériaux.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé la thermodynamique des équilibres entre phases, le transfert de matière, le transfert de chaleur et la mécanique des fluides.

Contenu de la matière :

1. Diffraction de rayons X

- Introduction
- Présentation des états cristallins et amorphes. Interaction des RX avec la matière.
Production des RX
- Diffraction des RX. Condition d'apparition du phénomène de diffraction
- Les techniques de diffraction de RX
- La diffraction sur poudre
- Aspects expérimentaux en diffraction des rayons X par les poudres (chambres, diffractomètre ; préparation de l'échantillon ; facteurs influençant les principales)
- Enregistrement d'un diagramme de diffraction X sur poudre
- Conditions d'enregistrements
- Données obtenues
- Exploitation d'un diagramme de diffraction de poudre
- Recherche de pics
- Décomposition du diagramme
- Affinement de profil de raie
- Affinement de profil total
- Recherche de maille
- Les méthodes du monocristal
- Méthode de Laue
- Méthode du cristal tournant
- Méthode de Weissenberg (diagramme de Weissenberg d'un plan $hk0$ et hkl)
- Méthode de précession

2. Les techniques d'analyse chimique globale

- Spectrométrie de fluorescence X
- Spectrométries d'émission
- Spectrométrie par torche à plasma (ICP-optique)
- Spectrométrie par décharge lumineuse (SDL)
- Spectrométrie par étincelle
- Analyse par ablation laser

- Spectromètre à décharge lumineuse
- Analyseurs de gaz : analyse de O, N, C et S
- Analyse de l'oxygène et de l'azote
- Analyse du carbone et du soufre

3. Les techniques d'analyse chimique locale

- Microanalyse X
- La microsonde de Castaing (instrument essentiellement destiné à la microanalyse)
- La microanalyse, accessoire des microscopes électroniques à balayage et en transmission
- Spectrométrie par dispersion de longueur d'onde (WDS) pour la microsonde
- Spectrométrie par sélection en énergie (EDS) pour le MEB et le TEM

4. Techniques de Caractérisation de Surface

- Spectrométrie de photo-électrons (ESCA ou XPS) et d'électrons Auger (Analyse élémentaire et chimique)
- Spectrométrie à décharge lumineuse (SDL)
- Spectrométrie d'émission ionique secondaire (SIMS)

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- M. Van Meersche et J. Feneau-Dupont : *Introduction à la Cristallographie et à la Chimie Structurale*
- D. Schwarzenbach : *Cristallographie – Presses polytechniques et universitaires romandes, 1993*
- J. Protas : *Diffraction des rayonnements – Dunod (Paris), 1999*
- J. J. Rousseau : *Cristallographie géométrique et radiocristallographie – Masson (Paris), 1995*
- C. Hammond : *The Basis of Crystallography and Diffraction*
- J. W. Smith : *Geometrical and Structural Crystallography*
- R. Guinebrière : *Diffraction des rayons X sur échantillons polycristallins*

Semestre : 1

UE : Méthodologie

Matière : TP Elaboration des Matériaux 1

Objectifs de l'enseignement

Ce module pratique vise à initier les étudiants aux différentes méthodes d'élaboration des matériaux solides en laboratoire, notamment la voie solide, les méthodes de chimie douce (sol-gel, coprécipitation), les méthodes sèches et les techniques hydrothermales. L'accent est mis sur l'acquisition des techniques expérimentales et l'analyse critique des résultats obtenus.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir des bases en chimie générale, en chimie des solutions, ainsi qu'en manipulation de laboratoire de base.

Contenu de la matière :

1. TP Voie solide

2. TPs : Méthodes de la chimie douce

- Co-précipitation
- Sol-gel
- Citrate
- Nitrate

3. TP Méthodes sèches (classiques)

4. TP Méthodes céramiques

5. TP : Elaboration hydrothermale des oxydes métalliques semiconducteurs (TCO)

6. TP : Elaboration de nanopoudres d'oxyde de zinc (ZnO) par voie hydrothermale

7. TP : Elaboration de SnO₂ par la méthode sol-gel

8. TP : Elaboration de poudres de TiO₂ par la méthode sol-gel modifiée

9. TP : Préparation d'un matériau composite organique/inorganique

10. TP : Elaboration hydrothermale des oxydes métalliques semiconducteurs

Semestre : 1

UE : Méthodologie

Matière : TP Caractérisation de Matériaux 1

Objectifs de l'enseignement

Ce module pratique vise à initier les étudiants aux techniques courantes de caractérisation des matériaux, notamment la diffraction des rayons X (DRX), la fluorescence X (XRF), la spectroscopie IR et UV-Vis, l'analyse thermique (ATD/ATG), ainsi que l'utilisation de logiciels libres pour l'analyse structurale. L'accent est mis sur la compréhension des principes, l'interprétation des résultats et l'analyse critique des données expérimentales.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir des bases en chimie générale, en cristallographie, en physique des matériaux et en manipulation de laboratoire. Une familiarisation avec les outils informatiques scientifiques est également utile.

La liste des TP citée ci-dessous n'est pas exhaustive. Elle constitue une orientation d'ordre général et dépendra des ressources disponibles pour chaque établissement

Contenu de la matière :

Caractérisation structurale de nanocomposite synthétisé

1. Diffraction des rayons X

- Détermination du paramètre de maille et des (hkl) de : Cu, Zn
- Caractérisation par diffraction des rayons X des échantillons d'argile et d'argiles pontées
- Détermination du paramètre de maille et des phases de l'alliage Cu-Zn

2. Fluorescence des rayons X

- Détermination de composition chimique d'un alliage d'aluminium
- Détermination de la composition de ciment : exemple ciment de l'ACC (M'sila)

3. Spectroscopie

- Préparation d'un matériau composite organique/inorganique et analyse des spectres obtenus en IR
- Couplage de l'UV-Vis et de l'électrochimie. Analyse de changements de concentrations des solutions d'électrolyte lors d'une réaction électrochimique

4. Analyse thermique

- Caractérisation par ATD et ATG des échantillons d'argile et d'argiles pontées
- Détermination de la porosité des matériaux nanocomposites à matrice minérale

Travaux pratiques avec des logiciels libres et open source

1. Visualisation des structures cristallines avec VESTA

- Lecture d'un fichier CIF (Crystallographic Information File)
- Visualisation de la maille cristalline, plans (hkl), polyèdres de coordination
- Calcul des distances interatomiques, angles et volumes de maille

Activités :

- Ouvrir plusieurs fichiers CIF (NaCl, graphite, quartz...).
- Afficher les plans (100), (110), (111).
- Représenter les polyèdres de coordination.
- Exporter des images annotées.

2. Interprétation d'un diffractogramme RX simulé

- Compréhension des pics de diffraction
- Identification des plans (hkl) associés aux pics
- Vérification de la loi de Bragg

Activités :

- Utiliser des diffractogrammes simulés (ex. poudre de NaCl, graphite).
- Associer chaque pic à un plan cristallin.
- Vérifier que les positions angulaires obéissent à la loi de Bragg.

3. Raffinement de structure avec FullProf (Rietveld)

- Utilisation de FullProf pour raffiner une structure à partir de données expérimentales
- Obtention des paramètres de maille, qualité du fit (R_{wp} , χ^2)

Activités :

- Charger un fichier expérimental de diffraction (poudre).
- Créer le fichier .pcr avec EdPCR.
- Ajuster les paramètres de maille, facteur d'échelle, largeur des pics.
- Interpréter les résultats du raffinement.

4. Identification de phase à partir d'un diffractogramme inconnu

- Identification d'une phase inconnue à partir de données expérimentales
- Utilisation des bases de données (ICSD, COD)

Activités :

- Recevoir un fichier de diffraction (poudre) inconnu.
- Simuler des diffractogrammes de candidats avec FullProf.
- Comparer les pics, trouver la meilleure correspondance.
- Justifier l'identification.

5. Influence de la structure cristalline sur le motif de diffraction

- Comparer les diffractogrammes de différentes structures cristallines.
- Comprendre l'effet de la symétrie et du type de maille (cubic, tetragonal, hexagonal...).

Activités :

- Comparer NaCl (cubique), graphite (hexagonal), rutile-TiO₂ (tétragonal).
- Simuler les diffractogrammes à partir des fichiers CIF.
- Identifier les effets de la symétrie sur l'intensité et la position des pics.

Ressources communes à tous les TP

Logiciels : VESTA, FullProf Suite (EdPCR, WinPlotr), PowderCell (optionnel)

Fichiers CIF : disponibles sur <https://www.crystallography.net/cod/>

Données expérimentales ou simulées : fournies par l'enseignant

Ou bien ce programme

Semestre : 1

UE : Méthodologie

Matière : TP Caractérisation de Matériaux 1

Objectifs de l'enseignement

Ce module pratique vise à initier les étudiants à l'utilisation des logiciels libres et open source pour la caractérisation structurale des matériaux. Il permet de comprendre les bases de la visualisation cristalline, l'interprétation des diffractogrammes, le raffinement structural par la méthode de Rietveld, ainsi que l'identification de phases inconnues à partir de données expérimentales.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir des bases en cristallographie, en diffraction des rayons X, ainsi qu'une familiarisation avec l'utilisation d'outils informatiques scientifiques.

La liste des TP citée ci-dessous n'est pas exhaustive. Elle constitue une orientation d'ordre général et dépendra des ressources disponibles pour chaque établissement

Contenu de la matière :

1. Visualisation des structures cristallines avec VESTA

- Lire un fichier CIF (Crystallographic Information File)
- Visualiser la maille cristalline, les plans cristallographiques (hkl)
- Calculer les distances interatomiques, angles et volumes de maille

Activités :

- Ouvrir plusieurs fichiers CIF (NaCl, graphite, quartz...)
- Afficher les plans (100), (110), (111)
- Représenter les polyèdres de coordination
- Exporter des images annotées

2. Interprétation d'un diffractogramme RX simulé

- Comprendre les pics de diffraction
- Identifier les plans (hkl) associés aux pics
- Vérifier la loi de Bragg

Activités :

- Utiliser des diffractogrammes simulés (ex. poudre de NaCl, graphite)
- Associer chaque pic à un plan cristallin
- Vérifier que les positions angulaires obéissent à la loi de Bragg
- Logiciels utilisés : WinPlotr, VESTA

3. Raffinement de structure avec FullProf (Rietveld)

- Apprendre à utiliser FullProf pour raffiner une structure à partir de données expérimentales
- Obtenir les paramètres de maille, la qualité du fit (R_{wp} , χ^2)

Activités :

- Charger un fichier expérimental de diffraction (poudre)
- Créer le fichier .pcr avec EdPCR
- Ajuster les paramètres : facteur d'échelle, largeur des pics
- Interpréter les résultats du raffinement

4. Identification de phase à partir d'un diffractogramme inconnu

- Identifier une phase inconnue à partir de données expérimentales
- Utiliser les bases de données de diffraction (ICSD, COD)

Activités :

- Recevoir un fichier de diffraction (poudre) inconnu
- Simuler des diffractogrammes de candidats avec FullProf
- Comparer les pics et trouver la meilleure correspondance
- Justifier l'identification

5. Influence de la structure cristalline sur le motif de diffraction

- Comparer les diffractogrammes de différentes structures cristallines
- Comprendre l'effet de la symétrie et du type de maille (cubique, tétragonal, hexagonal...)

Activités :

- Comparer NaCl (cubique), graphite (hexagonal), rutile-TiO₂ (tétragonal)
- Simuler les diffractogrammes à partir des fichiers CIF
- Identifier les effets de la symétrie sur l'intensité et la position des pics

Ressources communes à tous les TP

- Logiciels : VESTA, FullProf Suite (EdPCR, WinPlotr), PowderCell (optionnel)
- Fichiers CIF : disponibles sur <https://www.crystallography.net/cod/>
- Données expérimentales ou simulées : fournies par l'enseignant

Semestre : 1

UE : Méthodologie

Matière : Intelligence artificielle et Machine Learning 1

Objectifs de l'enseignement

L'enseignement de cette matière permet à l'étudiant d'acquérir les bases de l'intelligence artificielle et de l'apprentissage automatique (Machine Learning), avec un accent particulier sur leurs applications dans les sciences des matériaux. Les étudiants découvriront les concepts fondamentaux de la modélisation basée sur les données et apprendront à appliquer des techniques d'apprentissage automatique pour résoudre des problèmes concrets liés aux propriétés et structures des matériaux.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir des bases en programmation (notamment en Python), en statistiques et en chimie ou physique des matériaux.

Contenu de la matière :

1. Introduction à l'IA et à l'apprentissage automatique (2 semaines)

- Aperçu de l'intelligence artificielle et ses domaines d'application
- Importance des données dans l'IA et l'apprentissage automatique

2. Concepts de base de l'apprentissage automatique (3 semaines)

- Apprentissage supervisé ou non supervisé.
- Algorithmes clés de l'apprentissage automatique : régression, classification, regroupement.
- Mesures d'évaluation (MAE, R^2 , précision)

3. Collecte et traitement des données (3 semaines)

- Ingénierie des caractéristiques et techniques de prétraitement des données.
- Traitement de l'ajustement excessif et de l'ajustement insuffisant.
- Bases de données sur les matériaux : Materials Project, OQMD, AFLOW.

4. Apprentissage automatique pratique en sciences des matériaux (3 semaines)

- Étude de cas : Prédiction des propriétés des matériaux (bande interdite, etc.).
- Utilisation de modèles d'apprentissage automatique pour des tâches simples de classification et de régression.

5. Fondements de l'apprentissage profond (3 semaines)

- Introduction aux réseaux neuronaux.
- Principaux cadres d'apprentissage profond : TensorFlow, Keras, PyTorch.
- Application : Prédiction de la structure cristalline à l'aide de réseaux neuronaux.

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- Aurélien Géron : **Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow** – O'Reilly Media (2019)
- Christopher M. Bishop : **Pattern Recognition and Machine Learning** – Springer (2006)
- Langage de programmation : Python
- Environnements : Jupyter Notebooks
- Bibliothèques : Scikit-learn, Pandas, Matplotlib
- Outils dédiés aux matériaux : Matminer, Pymatgen
-

Semestre : 1

UE : Méthodologie

Matière : Propriétés Physicochimiques des Matériaux

Objectifs de l'enseignement

Ce module vise à comprendre et analyser les propriétés physico-chimiques des matériaux, avec un accent particulier sur leurs comportements diélectriques, magnétiques, élastiques, mécaniques et optiques. À la fin du semestre, l'étudiant sera capable d'identifier, interpréter et relier ces propriétés aux structures atomiques et microstructurales des matériaux.

Connaissances préalables recommandées

Pour suivre cette matière efficacement, l'étudiant doit avoir des bases en structure de la matière (structures cristallines, liaisons atomiques). Une compréhension des propriétés fondamentales des matériaux (conductivité, rigidité, comportement sous contrainte) est également recommandée, ainsi que des notions de mathématiques appliquées pour modéliser certains phénomènes.

Contenu de la matière :

1. De l'atome au matériau (6 semaines)

- Atomes – Liaisons – Structure (cristaux – amorphes)
- Classification des matériaux : Métaux et alliages – Céramiques et verres – Polymères
- Composites

2. Propriétés électriques (6 semaines)

- Conductivité - Métaux - Isolants - Semi-conducteurs

3. Propriétés magnétiques (8 semaines)

- Moment magnétique - (dia, para, ferro, antiferro, ferri)-magnétisme
- Généralités sur l'effet magnétostrictif
- Magnéto-électricité
- Applications

4. Propriétés optiques (6 semaines)

- Absorption, réflexion et transmission de la lumière
- Matériaux optiques : semi-conducteurs, verres, polymères
- Applications : photovoltaïque, optoélectronique

5. Propriétés thermiques (6 semaines)

- Dilatation
- Conduction
- Diffusion

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- C. Kittel: Introduction to Solid State Physics – Wiley, (2005)
- Michel Soustelle : Aide-mémoire Science des Matériaux – Dunod, Paris, (2004) (pp. 89–130)
- W. D. Callister : Materials Science and Engineering: An Introduction – Wiley, (2007)
- A. Moliton : Physique des matériaux pour l'électronique* – Hermès-Lavoisier, (2007)

Semestre : 1

UE : Découverte

Matière : Nanosciences et Nanotechnologie

Objectifs de l'enseignement

L'enseignement de cette matière permet à l'étudiant de découvrir les fondements des nanosciences et des nanotechnologies, ainsi que leurs domaines d'applications variés tels que l'énergie, la santé, la nanoélectronique, la spintronique, et autres domaines technologiques avancés.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir des bases solides dans les sciences des matériaux ainsi que des notions sur les techniques d'élaboration des couches minces.

Contenu de la matière :

1. Préambule : Contexte actuel des nanosciences et nanotechnologies

2. Introduction aux nanosciences (2 semaines)

- L'échelle nano et ses applications
- Le comportement de la matière à cette échelle
- Fabrication des nanos
- Définition et champs d'application : aspect pluridisciplinaire

3. Les outils de fabrication et d'observation des nano-objets (3 semaines)

- Les techniques de fabrication des nano-objets : Comment fabriquer un nanos : Les différentes approches
- Les techniques d'observation de la matière à l'échelle nano : les appareils de microscopie utilisés à cette échelle

4. La Nanochimie (3 semaines)

- Le carbone et les différents nanomatériaux associés : Exemples d'application
- Synthétiser des nanoparticules (différentes stratégies), les solides poreux ?...

5. La Nanophysique (3 semaines)

- Les composants de la nanoélectronique : les effets quantiques dans la conduction électronique aux échelle nanométriques, Nanoélectronique sur silicium
- Les structures onano-optiques : Comportement de la lumière à l'échelle nano, Couleurs et nanoparticules, Emettre, guider et détecter la lumière avec des nano-composants....

6. Les Nanobiotechnologies (3 semaines)

- Nanobiologie : Voir le vivant aux nanoéchelles, détecter des interactions moléculaires, manipuler des objets biologiques nanométriques, ...
- Nanomédicaments : les nanomédicaments ; les nanovecteurs, design de nanovecteurs pour mieux cibler les cellules, interaction avec les cellules, ...
- Micro/nanofluidique : Lois d'écoulement des liquides biologiques à l'échelle micro/nano, Caractérisation de biomolécules dans des nanopores, Laboratoires sur puces, microfluidique digitale

7. Nanosciences et Société (2 semaines)

- Les nanosciences et les politiques scientifiques
- Nanotoxicité : enjeux sanitaires (effets des nanoparticules sur la santé),
- Ecotoxicité : enjeux environnementaux
- Réglementation : Cadre réglementaire des nanotechnologies ?

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- *Luque, S. Hegedus: Handbook of Photovoltaic Science and Engineering – Wiley*
- *Marti : Next Generation Photovoltaics– Taylor & Francis Group*
- *Yves Quéré : Physique des matériaux – Ellipses*
- *Périodiques : Solar Energy Materials & Solar Cells, Applied Physics*

Semestre : 1

UE : Découverte

Matière : Méthodes Thermiques d'analyse

Objectifs de l'enseignement

Les Méthodes Thermiques d'analyse vont donner aux étudiants des connaissances de base utilisées dans la caractérisation des matériaux synthétisés.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir des bases solides en analyses thermiques, notamment une compréhension des phénomènes physico-chimiques liés aux variations thermiques.

Contenu de la matière :

1. Analyse thermique (3 semaines)

- Principe général des méthodes d'analyse thermique
- Différentes techniques d'analyses thermiques :
- Analyse Thermogravimétrique (TG)
- Analyse Thermique Différentielle (DTA)
- Analyse Calorimétrique Différentielle (DSC)
- Analyse combinée TG-DSC
- Appareillage utilisé en analyse thermique

2. Analyse Thermogravimétrique (ATG) (4 semaines)

- Définition,
- Principe,
- Paramètres extraits des Courbes ATG,
- Application de ATG,
- Allure théorique de courbe par ATG,
- Principaux facteurs affectant les courbes obtenues par ATG,
- Interprétation cinétique d'une courbe ATG
- Analyse Thermique Différentielle et Thermogravimétrique couplées

3. Dilatométrie (3 semaines)

- Dilatométrie thermique
- Dilatométrie différentielle

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- A-P Bouaziz, R Rollet : **L'Analyse Thermique** – Tome 2
- Robert F. Speyer : **Thermal Analysis of Materials**

Semestre : 1

UE : Transversale

Matière : Durabilité, vieillissement et recyclage des matériaux

Objectifs de l'enseignement

L'enseignement de cette matière permet à l'étudiant de maîtriser le concept de durabilité d'un matériau et de comprendre les mécanismes susceptibles de faire évoluer sa structure tout en conservant les fonctions pour lesquelles il a été conçu. À la fin du semestre, l'étudiant sera capable d'identifier les types de vieillissement, les paramètres influençant la durabilité et leur impact sur les principales familles de matériaux.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir des bases solides en physico-chimie et en physique des matériaux. Les connaissances requises incluent la chimie générale, la chimie physique, la chimie analytique ainsi que les propriétés fondamentales des matériaux.

Contenu de la matière :

1. Durabilité (3 semaines)

- Définition
- Les différents objectifs de l'évaluation de la durabilité
- Durabilité à haute température
- Durabilité en milieu humide

2. Vieillissement (5 semaines)

- Définition du vieillissement
- Principes du vieillissement des matériaux
 - Vieillissement physique
 - Vieillissement chimique
 - Vieillissement biologique
- Mécanismes de vieillissement
 - Vieillissement thermique
 - Vieillissement photochimique
 - Vieillissement hydrolytique des matériaux
 - Vieillissement des matériaux par absorption de solvants et l'hydrolyse
 - Vieillissement par migration d'adjuvant
 - Vieillissement naturel
 - Vieillissement artificiel accéléré
 - Vieillissement par rayonnement ionisant
- Méthodes de prédiction de la durée de vie

3. La conception durable (2 semaines)

4. Vieillissement, durabilité et maîtrise des risques (3 semaines)

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- OFTA : Observatoire Français Des Techniques Avancées, *Vieillissement et durabilité des matériaux*, Sciences & Techniques, 8 Juin 2003

III - Programme détaillé par matière du semestre S2

Semestre : 2

UE : Fondamentale

Matière : Électrochimie Appliquée aux Matériaux

Objectifs de l'enseignement

L'enseignement de cette matière permet à l'étudiant d'assimiler les fondements de l'électrochimie appliquée aux matériaux. Il vise également à lui permettre de mettre en œuvre et d'exploiter les principales techniques électrochimiques pour la caractérisation et la modification des matériaux. Enfin, il doit être capable de concevoir et planifier des protocoles expérimentaux adaptés aux applications telles que le stockage d'énergie, la corrosion, etc.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé les notions d'oxydoréduction et d'électrochimie des solutions.

Contenu de la matière :

1. Rappels fondamentaux – Thermodynamique et cinétique électrochimique (4 semaines)

- Thermodynamique électrochimique
 - Potentiel électrochimique, électrode de référence, potentiel formel
 - Cellules électrochimiques, lois de Nernst et de Faraday
 - Diagrammes de Pourbaix
 - Double couche électrochimique : modèles de Helmholtz, Gouy-Chapman et Stern
- Cinétique électrochimique
 - Phénomène de polarisation et équation de Butler-Volmer
 - Cinétique de transfert de charge pur, cinétique mixte de transfert de charge et diffusion
 - Cinétique de diffusion pure
 - Surtension de cristallisation

2. Méthodes électrochimiques d'analyse (4 semaines)

- Voltamétrie : cyclique, linéaire, impulsionnelle
- Ampérométrie, potentiométrie, coulométrie
- Spectroscopie d'impédance électrochimique (EIS)

3. Corrosion et protection des matériaux (4 semaines)

- Mécanismes électrochimiques de la corrosion
- Techniques de caractérisation : courbes de polarisation, EIS
- Protection anodique et cathodique
- Revêtements passivants

4. Électrodéposition et modification de surface (4 semaines)

- Cinétique de l'électrodépôt, surpotentiel, croissance des couches
- Dépôts métalliques, alliages, couches minces fonctionnelles
- Traitements de surface électrochimiques

5. Électrochimie des semi-conducteurs et réactions photoélectrochimiques (4 semaines)

- Notions sur l'électrochimie des semi-conducteurs
 - Bases de l'électrochimie des semi-conducteurs
 - Relation de Mott-Schottky
 - Quelques applications
- Réactions photoélectrochimiques
 - Introduction

- Processus électrochimiques et photoélectrochimiques aux électrodes semi-conductrices
- Exploitation des processus photoélectrochimiques
- Photoélectrolyse et électrolyse photoassistée

6. Électrochimie, micro- et nanostructures (4 semaines)

- L'électrochimie comme outil d'élaboration de nanostructures
 - Électrodéposition de nanostructures métalliques
 - Couches monomoléculaires
 - Micro- et nano-usinage
 - Couches d'oxyde poreuses
 - Semi-conducteurs poreux
- L'électrochimie comme outil d'étude de nanostructures
 - Microscopies à l'interface électrochimique
 - Nanoparticules métalliques : blocage de Coulomb
 - Nanoparticules semi-conductrices : effets quantiques

7. Électrochimie des solides (3 semaines)

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- Fabien Miomandre : **Électrochimie : Des concepts aux applications – Cours, travaux pratiques et problèmes corrigés**
- Robert Roux : **Thermodynamique chimique et électrochimique**
- D. Landolt : **Corrosion et chimie de surface des métaux* – Traité des Matériaux, Volume 12, PPUR*
- Allen J. Bard, Larry R. Faulkner : **Électrochimie : principes, méthodes et applications* – Masson, 1983*
- G. Barral, B. Le Gorrec, C. Montella : **Cours et exercices : Notions élémentaires sur les cellules électrochimiques* – Grenoble, 2003*
- Jean Besson : **L'électrochimie* – PUF, Paris, 1979*
- Jean Besson, J. Guittou : **Manipulations d'électrochimie – Introduction à la théorie et à la pratique de la cinétique électrochimique* – Masson, Paris, 1972*
- Jean Besson : **Précis de thermodynamique et de cinétique électrochimiques* – Ellipses-Marketing, Paris, 1984*
- Michel Chemla : **Chimie Physique – Tome 2 : Électrochimie, cinétique chimique, états de la matière* – Dunod*

Semestre : 2

UE : Fondamentale

Matière : Méthodes d'élaboration de Matériaux 2

Objectifs de l'enseignement

L'objectif de cet enseignement est d'aborder les différentes étapes dans l'élaboration d'une nanostructure en fonction de l'application visée et des caractérisations souhaitées. Il vise également à présenter les principales techniques d'élaboration des matériaux et nanostructures inorganiques, ainsi qu'à introduire les méthodes de préparation des films minces et nanostructures.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir des bases solides en nanosciences et nanotechnologie, chimie et physique des matériaux, électrochimie ainsi que les propriétés physico-chimiques des matériaux.

Contenu de la matière :

1. Introduction et stratégies d'élaboration (2 semaines)

2. Élaboration par des méthodes mécano-chimiques (5 semaines)

- Mécanosynthèse (Mechanical Alloying)
 - Amorphisation par mécanosynthèse
 - Nanocristaux par mécanosynthèse
 - Paramètres influençant la nature du produit obtenu par mécanosynthèse
 - Durée de broyage
 - Matériaux constitutifs des containers et des billes
 - Nature de la poudre
 - Nature des gaz
- La synthèse micro-onde
 - Principe
 - Appareillage
 - Applications

3. Synthèse de monocristaux (6 semaines)

- Croissance de monocristaux à partir de l'état fondu
 - Méthode de Czochralski – méthode de tirage
 - Méthode de Kyropoulos
 - Méthode de Bridgman-Stockbarger
 - Méthode Verneuil
 - Fusion de zone verticale
- Croissance de monocristaux à partir de solvants (cristallisation en solution)
 - Méthode du flux

4. Élaboration de couches minces (9 semaines)

- Introduction aux couches minces
 - Intérêts et applications technologiques des couches minces
 - Théorie cinétique des gaz
 - Techniques du vide : production et mesure
- Mécanismes de croissance et modes de croissance
 - Les différents modes de croissance
 - Caractérisation du mode de croissance
 - Nucléation et croissance cristalline
 - Croissance organisée
- Les principales techniques d'élaboration des couches minces
 - Classification

- Techniques chimiques : électrodéposition, bain chimique, sol-gel...
- Techniques physiques : évaporation sous vide, sputtering, épitaxie par jets moléculaires, ablation laser...

Références (*Livres et photocopiés, sites internet, etc.*) :

- *Céramiques et verres : principes et techniques d'élaboration* – Traité des matériaux, Volume 16
- B. R. Pamplin : *Crystal Growth*
- J.C. Brinker, G.W. Scherer : *Sol-Gel Science : The Physics and Chemistry of Sol/Gel Processing*
- Zangwill : *Physics at Surfaces* – Cambridge University Press, 1988
- L. Feldman, J. W. Mayer : *Fundamentals of Surface and Thin Film Analysis* – P.T.R Prentice-Hall Inc., 1986
- M. Villain, A. Pimpinelli : *Physique de la croissance cristalline* – Édition *Alea Saclay*, 1995

Semestre : 2

UE : Fondamentale

Matière : Matériaux Fonctionnels

Objectifs de l'enseignement

L'enseignement de cette matière permet aux étudiants de comprendre en profondeur les matériaux dont les propriétés physiques et chimiques donnent lieu à des applications particulières dans des domaines tels que l'électronique, l'énergie, la santé et l'environnement. Une importance particulière est accordée à la relation entre la structure, les propriétés et la fonctionnalité.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé les bases de la chimie générale, la physique des matériaux, les notions de cristallographie et les principes fondamentaux de la thermodynamique et des propriétés électriques des matériaux.

Contenu de la matière :

1. Introduction aux matériaux fonctionnels (2 semaines)

- Définitions et classification
- Différence entre matériaux de structure et matériaux fonctionnels
- Domaines d'applications (électronique, optique, magnétique, énergie, capteurs...)

2. Propriétés physico-chimiques fondamentales (3 semaines)

- Conductivité électrique et thermique
- Propriétés diélectriques et ferroélectriques
- Propriétés magnétiques
- Effets thermoélectriques, piézoélectriques, électrochimiques

3. Matériaux conducteurs et semi-conducteurs (4 semaines)

- Métaux, alliages, oxydes conducteurs transparents
- Semi-conducteurs inorganiques (Si, GaAs, etc.)
- Semi-conducteurs organiques et polymères conducteurs
- Applications : diodes, transistors, cellules photovoltaïques

4. Matériaux pour l'optoélectronique (3 semaines)

- Diodes électroluminescentes (LEDs)
- Lasers à semi-conducteur
- Matériaux phosphorescents et fluorescents

5. Matériaux pour le stockage et la conversion d'énergie (4 semaines)

- Piles à combustible
- Batteries (Li-ion, Li-S, Na-ion...)
- Supercondensateurs
- Matériaux pour l'électrocatalyse (HER, OER)

6. Matériaux magnétiques et leurs applications (4 semaines)

- Types de magnétisme (ferro, ferri, anti-ferro...)
- Matériaux doux et durs
- Applications : mémoires, capteurs, dispositifs spintroniques

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- William D. Callister : *Materials Science and Engineering: An Introduction*
- B.I. Sharma : *Functional Materials: Preparation, Processing, and Applications*
- A.S. Edelstein & R.C. Cammarata : *Nanomaterials: Synthesis, Properties and Applications*
- Cours du Collège de France, cours en ligne (OCW, MOOCs), articles scientifiques récents (revues comme *Advanced Materials*, *Nature Materials*)

Semestre : 2

UE : Fondamentale

Matière : Méthodes de Caractérisation de Matériaux 2

Objectifs de l'enseignement

L'enseignement de cette matière permet à l'étudiant de comprendre les principes et les applications des techniques majeures utilisées dans l'étude et la caractérisation des matériaux et nanostructures. Il vise également à familiariser l'étudiant avec les techniques spectroscopiques et microscopiques avancées pour l'analyse structurale, morphologique, optique et électrique des matériaux.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir des bases solides en nanosciences et nanotechnologie, chimie et physique des matériaux, électrochimie ainsi que les propriétés physico-chimiques des matériaux.

Contenu de la matière :

1. Introduction (1 semaine)

2. Microscopies à sonde atomique : Microscopies en champ proche (AFM, STM, ...) (4 semaines)

- Présentation des méthodes de visualisation à l'échelle nanométrique
- Le microscope à effet tunnel (STM)
- Le microscope à force atomique (AFM)

3. Microscopies à faisceau d'électrons (MEB, MET) et microanalyse EDS (8 semaines)

- Principes de fonctionnement du MEB. Formation de l'image et modes de détection. Micro-analyse X (EDS/EDX) : principes et applications pour l'analyse élémentaire locale. Préparation des échantillons pour le MEB.
- Principes de fonctionnement du MET. Formation de l'image et modes de contraste (diffraction, masse-épaisseur). Techniques complémentaires (diffraction électronique, analyse chimique par spectroscopie électronique par perte d'énergie EELS). Préparation des échantillons pour le MET (amincissement).
- Microscopie électronique à haute résolution (utilisation des diaphragmes, contraste et Interprétation des images).

4. Caractérisations optiques (Photoluminescence, Raman, Gap optique) (5 semaines)

- Spectroscopie de photoluminescence : principes et applications
- Spectroscopie Raman : principes et applications
- Détermination du gap optique à partir des spectres UV-Vis

5. Caractérisation électrique : Mesure de la conductivité et effet Hall (6 semaines)

- Méthodes électriques : Conductivité électronique sur poudres, méthode des deux pointes.
- Conductivité électronique sur barreau : méthode des quatre pointes. Conductivité ionique. Effet Seebeck, effet Hall

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- Williams, D. B., & Carter, C. B. (2009). *Transmission Electron Microscopy: A Textbook for Materials Science* (2nd ed.). Springer
- Goldstein, J. et al. (2017). *Scanning Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis* (4th ed.). Springer
- Cullity, B. D., & Stock, S. R. (2014). *Elements of X-Ray Diffraction* (3rd ed.). Pearson

Semestre : 2

UE : Méthodologie

Matière : TP Méthodes Spectroscopiques

Objectifs de l'enseignement

L'objectif de ce module pratique est d'apprendre à l'étudiant à manipuler les principales méthodes physico-chimiques d'analyse spectroscopique. À la fin du semestre, l'étudiant sera capable de réaliser des analyses qualitatives et quantitatives à l'aide des techniques spectroscopiques courantes.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir acquis les notions fondamentales en chimie analytique et en caractérisation des matériaux, telles que celles enseignées dans les unités fondamentales et au niveau licence.

Contenu de la matière :

- 1. TP sur la spectroscopie UV-VIS,**
- 2. TP sur la spectroscopie IR,**
- 3. TP sur la spectroscopie de masse**
- 4. TP sur la spectroscopie d'absorption et d'émission atomique**
- 5. TP sur l'analyse par CPG**
- 6. TP sur l'analyse par HPLC**
- 7. TP sur l'analyse en SAA ou en Colorimétrie**
- 8. TP sur des autres méthodes de caractérisation nécessaires**

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- Maurice Pinta et Coll. : *Spectrométrie d'absorption atomique – Applications à l'analyse chimique* MASSON et Cie, Paris, 1971
- Steve Gillet, D. Sc. : *Cours de Chimie Analytique et Caractérisation des Matériaux – La Spectrométrie* – <http://perso.latrimu.com/shagar>
- P. Rollet ; R. Bouaziz : *L'analyse thermique* – Gauthier-Villars, Paris, 1972
- Douglas A. Skoog, Donald M. West, James J. Holler : *Chimie Analytique* – Editions De Boeck, 1997

Semestre : 2

UE : Méthodologie

Matière : Modélisation des Matériaux

Objectifs de l'enseignement

Cet enseignement permet à l'étudiant de s'imprégner de l'intérêt de construire des modèles proches de la réalité afin de leur soutirer des informations sur les propriétés du système étudié. Il vise également à familiariser l'étudiant avec les outils de base de la modélisation moléculaire et lui permettre d'interpréter les phénomènes sous-jacents liés aux observables ou grandeurs calculées.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé le programme de licence en chimie théorique et les bases de la physique des matériaux.

Contenu de la matière :

1. Bases de la mécanique quantique appliquée aux matériaux (4 semaines)

- Principes fondamentaux : fonction d'onde, Hamiltonien, équation de Schrödinger
- Méthode Hartree-Fock (HF), DFT – approximations de base

2. Méthodes de modélisation atomistique (5 semaines)

- Potentiels interatomiques : Lennard-Jones, Morse, Embedded Atom Method (EAM)
- Dynamique moléculaire : algorithme de Verlet, thermostats (NVE, NVT, NPT)
- Monte Carlo et échantillonnage statistique

3. Méthodes de modélisation mésoscopique (4 semaines)

- Méthode de champ moyen
- Méthode de dynamique brownienne
- Automates cellulaires et méthodes de percolation

4. Simulation des propriétés électroniques (5 semaines)

- Structure de bande, densité d'états (DOS)
- Calculs DFT : VASP, Quantum Espresso, etc.
- Conductivité et effets de dopage

5. Simulation des propriétés mécaniques et thermiques (5 semaines)

- Module d'Young, contrainte-déformation, rupture, dislocations, fissures
- Transport de chaleur : Fourier, phonons
- Capacité thermique, conductivité thermique

6. Modélisation des interfaces et des surfaces (4 semaines)

- Énergie de surface, adsorption, mouillage
- Interfaces solide/liquide et solide/solide
- Simulation des films minces et couches atomiques

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- Van Santen, Rutger A., Sautet, Philippe (Eds.) : *Computational Methods in Catalysis and Materials Science* – Wiley, 2009
- Feliciano Giustino : *Materials Modelling using Density Functional Theory: Properties and Predictions* – Oxford University Press, 2014
- Richard LeSar : *Introduction to Computational Materials Science: Fundamentals to Applications* – Cambridge University Press, 2014
- Z. Xiao Guo (Ed.) : *Multiscale Materials Modelling: Fundamentals and Applications* – CRC Press Inc, 2009
- David Sholl, Janice A. Steckel : *Density Functional Theory: A Practical Introduction* – Wiley-Interscience, 2009

Semestre : 2

UE : Méthodologie

Matière : Chimiométrie, Analyse des Données et Plans d'expériences

Objectifs de l'enseignement

L'objectif principal de cet enseignement est de former l'étudiant à une approche rationnelle et méthodique des problèmes expérimentaux. À la fin du semestre, l'étudiant sera capable de :

- *Comprendre les principes de la chimiométrie appliquée aux données expérimentales*
- *Extraire des informations pertinentes et fiables à partir de données chimiques complexes et multivariées*
- *Maîtriser les outils statistiques et mathématiques nécessaires pour exploiter efficacement les résultats expérimentaux*
- *Connaître les différents plans d'expériences et savoir choisir ou concevoir le plan le plus approprié pour modéliser et optimiser un système chimique*

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir des bases solides en statistiques de base, en analyse de données et en chimie analytique.

Contenu de la matière :

1. Fondamentaux de la statistique appliquée à la chimie (3 semaines)

- Statistiques descriptives : moyenne, médiane, variance, écart-type, coefficient de variation
- Loïs de distribution : loi normale, histogrammes, boxplots
- Tests d'hypothèses : Student, χ^2 , ANOVA simple
- Intervalles de confiance et niveau de signification (p-value)

2. Régression et modélisation statistique (3 semaines)

- Prétraitements des données : centrage, réduction, normalisation
- Régression linéaire simple et multiple
- Ajustement de courbes, évaluation du modèle (R^2 , RMSE, résidus)
- Sélection de variables : méthodes pas à pas, VIF, critère d'information (AIC)
- Validation croisée

3. Planification des expériences (Design of Experiments – DoE) (2 semaines)

- Définitions et historique
- Classification des plans d'expériences
- Concepts fondamentaux : facteur, réponse, interaction, répétabilité
- Introduction aux plans factoriels complets et fractionnaires (2^k)

4. Plans factoriels complets à 2 niveaux (2^k) (2 semaines)

- Construction : Matrice d'expériences.
- Traitement : Matrice de calcul des effets.
- Etude statistique : Régression linéaire, erreurs, tests des effets, analyse de variance (ANOVA) & construction de modèles empiriques.
- Optimisation & Validation.
- Exemples d'applications en TP - Logiciels : JMP, Statgraphics, Modde,... : Procédés de polymérisation : synthèse & caractérisation ; Chimie macromoléculaire : Compoundage préalable à la mise en œuvre des polymères ; Formulations inorganiques, etc.

5. Plans centraux composites à 2 niveaux (2 semaines)

- Construction : matrice d'expériences

- Traitement : matrice de calcul des effets
- Étude statistique : régression, erreurs, tests des effets, ANOVA
- Modélisation empirique, optimisation et validation
- Exemples d'applications en TP avec logiciels (JMP, Statgraphics, Modde, etc.)

6. Autres plans d'expériences (3 semaines)

- Plan fractionnaire / Plan de criblage.
- Plan de mélange.
- Exemples d'applications en TP : Analyse de données réelles de chimie des matériaux (formulation, ...) : Choix d'un plan d'expérience, collecte/simulation de données, modélisation, interprétation.
- Rédaction d'un rapport synthétique des résultats des plans d'expériences.

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- Jacques Goupy : *Les plans d'expériences : Optimisation du choix des essais et de l'interprétation des résultats*– Dunod, 5ème édition, 2017
- Sado, G., & Sado, M. C. : *Les plans d'expériences – De l'expérimentation à l'assurance qualité* – Afnor, 2000
- Tinsson, W. : *Plans d'expériences : constructions et analyses statistiques* – Springer Science & Business Media, 2010
- Goupy, J., & Creighton, L. : *Introduction aux plans d'expériences*– Hachette, 3ème édition, 2006
- Driesbeke, J. J., Fine, J., & Saporta, G. (Eds.) : *Plans d'expériences : applications à l'entreprise* – Editions Technip, 1997
- Linder, R. : *Les plans d'expériences : un outil indispensable à l'expérimentateur* – Presses des Ponts, 2005

Semestre : 2

UE : Méthodologie

Matière : Intelligence artificielle et Machine Learning 2

Objectifs de l'enseignement

L'objectif de cet enseignement est d'approfondir les notions d'apprentissage automatique en introduisant des concepts avancés tels que l'apprentissage profond, les réseaux neuronaux, les modèles génératifs et les techniques d'interprétation. À travers ce cours, l'étudiant sera capable d'utiliser ces outils pour la découverte et la conception de nouveaux matériaux dans le domaine des sciences des matériaux.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé les bases de l'apprentissage automatique, du langage Python ainsi qu'une compréhension basique des structures atomiques et cristallines.

Contenu de la matière :

1. Modèles basés sur les graphes dans les sciences de la matière (3 semaines)

- Les matériaux sont des graphes : atomes = nœuds, liaisons = arêtes.
 - Réseaux convolutionnels de graphes de cristaux (CGCNN).
 - Étude de cas : Prédiction des énergies de formation
2. Chapitre 2 : Modèles génératifs pour la conception de matériaux (3 semaines)

2. Modèles génératifs pour la conception de matériaux

- Introduction aux réseaux adversariels génératifs (GAN) et aux auto-encodeurs variationnels (VAE).
- Application : Conception de nouveaux matériaux et molécules.

3. Évaluation des modèles et interprétabilité (2 semaines)

- Techniques d'évaluation des modèles d'apprentissage profond
- Validation croisée, détection du surajustement (overfitting)
- Interprétabilité des modèles : SHAP, LIME

4. Techniques avancées de Machine Learning (3 semaines)

- Modèles d'ensemble : Random Forests, XGBoost, LightGBM
- Algorithmes avancés de régression et de classification
- Réduction de la dimensionnalité : Analyse en Composantes Principales (ACP), t-SNE, UMAP

5. Applications avancées en sciences des matériaux (3 semaines)

- Conception inverse assistée par IA pour la découverte de matériaux
- Prédiction des propriétés avancées : modules élastiques, température critique de supraconductivité
- Modélisation multi-échelle : couplage entre IA, dynamique moléculaire et théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

6. Mini-projet de spécialisation (Capstone Project) (3 semaines)

- Les étudiants réaliseront un projet dans lequel ils appliqueront l'IA/ML pour résoudre un problème en sciences de la matière, en utilisant les compétences acquises tout au long du semestre
- Mode d'évaluation

Outils et bibliothèques utilisés :

- *Langage de programmation : Python*
- *Environnements : Jupyter Notebooks*
- *Bibliothèques : TensorFlow, PyTorch*
- *Outils spécifiques : Matminer, Pymatgen*

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- *Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, Aaron Courville: Deep Learning– MIT Press, 2016*
- *François Chollet: Deep Learning with Python* – Manning Publications, 2017*
- *D. K. Jha, T. Chen, M. Tan, H. Chen: Machine Learning in Materials Science – Springer, 2018*
- *Kristin Persson et al.: Data Science for Materials Discovery – CRC Press*
- *Rajiv S. Mishra: Materials Informatics: Methods, Tools, and Applications – Elsevier*

Semestre : 2

UE : Découverte

Matière : Semi-conducteurs et applications technologiques

Objectifs de l'enseignement

L'objectif de cet enseignement est de permettre à l'étudiant de :

- Comprendre ce qu'est un semi-conducteur, ses propriétés physiques et les phénomènes qui les régissent
- Décrire et interpréter les processus électroniques et optoélectroniques dans les matériaux semi-conducteurs
- Identifier les différents domaines d'applications des semi-conducteurs
- Choisir le bon dispositif pour une application donnée
- Se former aux bases nécessaires pour poursuivre en recherche académique ou en R&D

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé les notions de chimie théorique, physique des matériaux, propriétés des semi-conducteurs et leurs comportements électroniques.

Contenu de la matière :

1. Introduction (2 semaines)

- Caractéristiques physiques des semi-conducteurs
- Types de matériaux et leurs domaines d'applications

2. Propriétés électroniques des semi-conducteurs (4 semaines)

- Structure de bandes
- Statistiques d'occupation des bandes
- Propriétés de transport
- Processus de recombinaison

3. Jonctions et interfaces (4 semaines)

- Jonctions métal/semi-conducteurs
- Jonction p-n à l'équilibre, Jonction p-n hors-équilibre

4. Composants électroniques (4 semaines)

- Transistors bipolaires
- Transistors à effet de champ
- Dispositifs quantiques
- Nouveaux matériaux

5. Composants optoélectroniques (4 semaines)

- Détecteurs
- Diodes électroluminescentes
- Diodes lasers
- Lasers à émission par la surface
- Lasers à cascade quantique

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- Charles Kittel : Physique de l'état solide – Dunod, 1998
- N. W. Ashcroft, N. D. Mermin : Solid State Physics – Saunders, 1976
- G. Bastard : *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures* – Éditions de Physique, 1992
- J. Pankove : Optical processes in semiconductors – Dover, 1975
- F. Lévy : Physique et technologie des semi-conducteurs – PPUR, 1995
- M. J. Kelly : Low Dimensional Semiconductors: Materials, Physics, Technology, Devices – Clarendon Press, Oxford, 1995

- H. Mathieu : Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques – Dunod, 2001
- S. M. Sze : Physics of Semiconductor Devices – John Wiley & Sons, 1981
- E. Rosencher, B. Vinter : Optoélectronique– Masson, Paris, 1997
- C. Weisbuch, B. Vinter : Quantum Semiconductor Devices – Academic Press, 1991

Semestre : S2

UE : Découverte

Matière : Matériaux polluants émergents

Objectifs de l'enseignement

L'objectif de cet enseignement est d'initier l'étudiant à la problématique des matériaux considérés comme polluants émergents. À la fin du semestre, l'étudiant sera capable de :

- Identifier les matériaux actuels classifiés comme contaminants émergents
- Comprendre leur impact environnemental, leur toxicité, persistance et bioaccumulation
- Analyser les stratégies de remplacement, récupération et valorisation
- Se sensibiliser aux aspects réglementaires (REACH, RoHS, CLP, etc.)
- Explorer les alternatives durables telles que les matériaux biosourcés ou recyclables

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé les bases de la chimie théorique, les propriétés des matériaux ainsi que les notions fondamentales de physique et chimie des semi-conducteurs.

Contenu de la matière :

1. Introduction aux polluants émergents (3 semaines)

- Définitions : contaminants émergents vs contaminants classiques
- Origines : industrielle, urbaine, agricole, médicale
- Exemples : phtalates, PFAS (substances per- et polyfluoroalkylées), retardateurs de flamme bromés, métaux lourds, plastifiants, nanomatériaux...

2. Impact environnemental des matériaux (4 semaines)

- Cycle de vie des matériaux – Analyse du Cycle de Vie (ACV)
- Persistance, dégradabilité, bioaccumulation
- Transferts dans les écosystèmes : sol, eau, air
- Effets sur la santé humaine et la faune

3. Cas concrets de matériaux problématiques (4 semaines)

- Les plastiques et microplastiques
- Les composés organiques volatils (COV) dans les peintures et adhésifs
- Métaux lourds présents dans les batteries et semi-conducteurs
- Nanomatériaux : exemples (oxyde de zinc, dioxyde de titane, nanoparticules de carbone)

4. Solutions et alternatives (4 semaines)

- Conception de matériaux plus sûrs – Design for Environment
- Utilisation de matériaux biosourcés et biodégradables
- Recyclage avancé et économie circulaire
- Innovation dans les composites et revêtements non toxiques

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- Jean-Louis Teyssier : Chimie verte et développement durable
- Collectif : Toxicologie et environnement – Risques chimiques et réglementation
- Organisation internationale : *Nanomatériaux et sécurité environnementale*, Rapport OMS
- François Gault : Écoconception des produits et services – Une approche prospective et analytique

Semestre : S2

UE : Transversale

Matière : Choix des Matériaux

Objectifs de l'enseignement

L'objectif de cet enseignement est de permettre à l'étudiant de faire un choix argumenté d'un matériau pour une application donnée, en tenant compte des propriétés physico-chimiques, des contraintes techniques, économiques et environnementales.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir des bases en science des matériaux ainsi qu'une compréhension générale des propriétés mécaniques, thermiques et électriques des matériaux.

Contenu de la matière :

1. Introduction générale (1 semaine)

2. Matériaux et propriétés (4 semaines)

- Cartographies des propriétés des matériaux
- Bases de sélection des matériaux
- Étude de cas de sélection

3. Choix et sélection multi-contraintes et multi-objectifs (4 semaines)

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- Ashby, S. : *Choix des matériaux* – Oxford Press, Londres, 1985
- Ashby, M.F. : *Materials Selection in Mechanical Design* – Elsevier, 2005

Programme détaillé par matière du semestre S3

Semestre : 3

UE : Fondamentale

Matière : Chimie Physique des Surfaces et Interfaces

Objectifs de l'enseignement

L'objectif de cet enseignement est de permettre à l'étudiant de comprendre les concepts fondamentaux liés aux surfaces et interfaces, et d'appliquer ces connaissances à des problématiques industrielles et technologiques telles que la catalyse, les nanotechnologies, les matériaux poreux et les phénomènes interfaciaux.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé les bases de la chimie générale, notamment les notions de liaisons chimiques, interactions intermoléculaires et thermodynamique. Une compréhension des propriétés physico-chimiques des matériaux est également conseillée.

Contenu de la matière :

1. Thermodynamique et structure des surfaces (8 semaines)

- Introduction
 - Notions de base : surface et interface – échelles macroscopique, microscopique et nanoscopique
 - Importance des surfaces et interfaces dans les domaines des matériaux, de la catalyse, de la biologie et des nanotechnologies
- Thermodynamique des surfaces
 - Énergie de surface et tension superficielle – mécanismes et mesures
 - Effets de la température et de la composition sur l'énergie de surface
 - Adsorption : modèles de Langmuir et BET – isothermes et applications
- Structure des surfaces
 - Reconstruction et relaxation des surfaces cristallines
 - Défauts superficiels : dislocations, marches, lacunes
 - Quelques notions sur les méthodes de caractérisation des surfaces

2. Interfaces et interactions avec le milieu extérieur (8 semaines)

- Types des interfaces
 - Interfaces solide-solide (joints de grains, hétérostructures).
 - Interfaces solide-liquide (mouillage, angle de contact, loi de Young).
 - Interfaces solide-gaz (adsorption/absorption, corrosion sèche).
- Phénomènes interfaciaux
 - Mouillage dynamique et statique, hystérise : Hétérogénéité chimique de la surface, surface hydrophobe, super-hydrophobe, hydrophile...)
 - Adhésion et cohésion (théories de van der Waals, interactions électrostatiques).
 - Influence de la rugosité et de la chimie de surface.
- Interactions avec le milieu extérieur
 - Interaction avec les atomes/ions, molécule.
 - Interaction avec les électrons (émission électronique, effets triboélectriques).
 - Interaction avec les photons (réflexion, absorption, photocatalyse).

3. Collage / Adhésion et techniques de caractérisation (9 semaines)

- Principes fondamentaux de l'adhésion : théories de l'adhésion (mécanique, électrostatique, diffusion, adsorption)

- Mécanismes de collage : liaisons chimiques, interactions physiques, enchevêtrement moléculaire
- Techniques de caractérisation de l'adhésion : tests de pelage, tests de cisaillement, test de traction
- Facteurs influençant la qualité des joints collés : préparation de surface, mouillabilité, compatibilité des matériaux
- Adhésifs structuraux et non-structuraux : classifications et propriétés
- Techniques d'amélioration de l'adhésion : traitements de surface spécifiques
- Vieillessement des interfaces collées : mécanismes de dégradation, durabilité

4. Phénomènes d'adsorption et caractérisation texturale (8 semaines)

- Concepts fondamentaux et définitions : État et état poreux ; Porosité et distribution de taille des pores ; Surface spécifique et son importance ; Classification des matériaux poreux (microporeux, mésoporeux, macroporeux).
- Phénomènes d'adsorption : Différence entre adsorption physique et adsorption chimique, Forces et interactions mises en jeu ; Facteurs influençant l'adsorption (température, pression, nature de l'adsorbat et de l'adsorbant)
- Modèles de conceptions d'adsorption
 - Modèle de Langmuir : Hypothèses du modèle (monocouche d'adsorption), Dérivation et forme linéarisée de l'équation de Langmuir. Applications et limites du modèle
 - Modèle de Freundlich : Équation empirique pour surfaces des produits hétérogènes, la forme et les Domaine d'application
 - Théorie BET (Brunauer, Emmett et Teller) : Extension du modèle de Langmuir à l'adsorption multicouche ; Dérivation de l'équation BET ; Détermination de la surface spécifique ; Limites de la théorie BET
- Méthodes d'analyse texturale :
 - Isothermes d'adsorption/désorption de gaz (classification IUPAC)
 - Instrumentation pour la mesure d'adsorption gazeuse
 - Porosimétrie au mercure
 - Méthodes complémentaires (t-plot, BJH)

5. Matériaux poreux et leurs applications (9 semaines)

- Microporeux Matériaux
 - Structure, propriétés et applications
 - Charbons actifs : préparation et caractéristiques
- Matériaux mésoporeux
 - Matériaux mésoporeux organisés à base de tensioactifs structurants (MCM-41, SBA-15)
 - Xérogels et aérogels : méthodes de synthèse et propriétés
- Applications des matériaux poreux
 - Catalyse de la procédure d'indemnisation des produits
 - Adsorption et séparation
 - Stockage d'énergie
 - Applications environnementales

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- G.A. Somorjai, Y. Li : *Surface Science : Foundations, Technology, and Application*
- R.F. Willis : *Surface Science : Principles and Applications*

- G.L. Richmond : *Interfacial Science : An Introduction*
- Horiuchi, Shin., Terasaki, Nao., Miyamae, Takayuki : *Interfacial Phenomena in Adhesion and Adhesive Bonding*
- T. Davies, E.K. Rideal : *Interfacial Phenomena*
- G.A. Somorjai : *Interfacial Science: An Introduction*
- J.C. Rivi re : *Handbook of Surface and Interface Analysis*

Semestre : S3

UE : UEF2

Matière : **Applications des supramolécules à l'état solide**

Objectifs de l'enseignement

L'objectif de cet enseignement est d'introduire les concepts fondamentaux de la chimie supramoléculaire appliquée aux matériaux à l'état solide. À la fin du semestre, l'étudiant sera capable de comprendre les mécanismes d'auto-assemblage dans les états solides, d'identifier les forces intermoléculaires impliquées, et d'explorer les propriétés physico-chimiques et applications technologiques des matériaux supramoléculaires cristallins.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé les bases de la chimie organique, inorganique et physique au niveau licence.

Contenu de la matière :

1. Introduction à la chimie supramoléculaire à l'état solide (3 semaines)

- Différences entre chimie supramoléculaire en solution et à l'état solide
- Forces intermoléculaires : liaisons hydrogène, interactions π - π , forces de Van der Waals, liaisons métal-ligand
- Concepts clés : auto-assemblage, reconnaissance moléculaire, porosité, ordre à longue distance

2. Matériaux supramoléculaires cristallins (7 semaines)

- Réseaux coordinationnels (MOFs – Metal Organic Frameworks)
- COFs (Covalent Organic Frameworks)
- ZIFs (Zeolitic Imidazolate Frameworks)
- Matériaux fluorescents
- Matériaux magnétiques moléculaires photo-commutables
- Nanoparticules supramoléculaires colorées
- Synthèse, caractérisation et stabilité thermique/chimique

3. Propriétés physico-chimiques des matériaux supramoléculaires (5 semaines)

- Porosité et surface spécifique – analyse BET, isothermes d'adsorption
- Propriétés optiques, électroniques et magnétiques
- Mécanismes d'adsorption et d'intercalation
- Changements de phase induits par stimuli (température, pression, lumière)

4. Applications technologiques (6 semaines)

- Stockage et séparation de gaz (CO_2 , H_2 , CH_4)
- Catalyse hétérogène supramoléculaire
- Détection chimique et capteurs
- Systèmes de libération contrôlée de médicaments
- Matériaux pour l'électronique (transistors organiques, diodes électroluminescentes)

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- J.-M. Lehn : **Supramolecular Chemistry: Concepts and Perspectives** – Wiley-VCH
- G. Férey : **Metal Organic Frameworks** – Chemistry
- Cours de chimie des matériaux poreux, Collège de France.
- Articles scientifiques récents (revues : **Nature Materials**, **Advanced Materials**, **Chemical Society Reviews**).

Semestre : 3

UE : Fondamentale

Matière : Nanomatériaux pour le Développement Durable

Objectifs de l'enseignement

L'objectif de cet enseignement est de développer une expertise dans les nanomatériaux utilisés dans les domaines de l'énergie, l'environnement et la santé. À travers ce cours, l'étudiant acquerra des connaissances sur la conception, la caractérisation, la fabrication et les applications des nanomatériaux dans divers secteurs liés au développement durable.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé les bases des nanosciences et nanotechnologies, chimie des matériaux, électrochimie ainsi que les propriétés physico-chimiques des matériaux.

Contenu de la matière :

1. Introduction – Contexte actuel (2 semaines)

- Contexte énergétique
- Contexte actuel des nanosciences et nanotechnologies dans le domaine des énergies

2. Méthodes de réalisation de nanostructures (6 semaines)

- Synthèse et fonctionnalisation de nano-objets
 - Synthèse par voie chimique en solution
 - Obtenir des nanoparticules individuelles – fonctionnalisation
 - Nano-objets organiques
- Approche bottom up (vers le haut)
 - Synthèses en solution par voie chimique ou électrochimique, avec ou sans template
 - Synthèses en phase vapeur – réacteur sous vide ou atmosphère contrôlée
- Approche top-down (vers le bas) :
 - Nanostructuration de couches minces (techniques de lithographie, gravure).
 - La lithographie (Haute technologie, miniaturisation des composants électroniques et informatiques, ...),
 - La nanoélectronique au service de l'homme et la loi de Moore

3. Nanomatériaux pour l'énergie et le développement durable (10 semaines)

- Introduction : Les nanomatériaux sont en plein essor dans le domaine de la recherche scientifique et technique en raison de leurs nombreuses applications innovantes, qu'elles soient physiques, chimiques ou biologiques.
- Nanomatériaux pour la conversion de l'énergie
 - Conversion photovoltaïque de l'énergie solaire – état des technologies et évolutions
 - Matériaux semi-conducteurs – généralités
 - Jonction P-N
 - Cellule solaire photovoltaïque – principe de base
 - Module photovoltaïque
 - Différentes filières : silicium, couche mince, organique
 - Apport des nanotechnologies : Vers les cellules photovoltaïques à base de nanomatériaux inorganiques
 - Cellules solaires à multi-jonctions ou tandem
 - Cellules solaires à niveaux intermédiaires
 - Cellules solaires à multi-génération de charges

- Cellules à conversion photonique
- Cellules solaires à porteurs chauds
- Nanomatériaux pour le stockage de l'énergie
 - Piles à combustible
 - Différentes technologies
 - Principes thermodynamiques de base
 - Piles à membrane échangeuse de protons
 - Piles à oxyde solide
 - L'hydrogène
 - Hydrogène comme vecteur énergétique
 - Production de l'hydrogène – différentes voies
 - Stockage de l'hydrogène – matériaux solides et composites nanostructurés
 - Avancées technologiques dans la production et le stockage de l'hydrogène
- Nanomatériaux pour l'environnement
 - Applications pour le traitement de l'eau et de l'air
 - Remplacement des filtres conventionnels par des nanomatériaux avancés
- Nanomatériaux pour la santé

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- Abdelilah Slaoui, Jean-François Guillemoles : **Nanomatériaux pour la conversion photovoltaïque** – L'Actualité Chimique, n° 331, juin 2009
- Florent Bègue, Éric Pineault : **L'hydrogène : énergie de transition ou nouveau mirage ?** – Relations, été 2022
- Abdelilah SLAOUI : **Nanostructures pour cellules photovoltaïques inorganiques** – Techniques de l'Ingénieur, 10/08/2010
- Daniel Lincot, Ludovic Escoubas, Jean François Guillemoles, Jean-Jacques Simon, Abdelilah Slaoui : **Nanomatériaux pour la conversion photovoltaïque de l'énergie solaire**

Semestre : 3

UE : UEF 1

Matière : Croissance cristalline

Objectifs de l'enseignement

L'objectif de cet enseignement est de permettre à l'étudiant de :

- Comprendre la définition de la croissance cristalline et les différents mécanismes impliqués
- Apprendre à contrôler la croissance cristalline pour obtenir un habitus spécifique
- Savoir déterminer la vitesse de croissance et identifier les mécanismes associés

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé les notions fondamentales de chimie des solides ainsi que les bases de cristallographie géométrique et structurale.

Contenu de la matière :

1. Introduction (1 semaine)

2. La Cristallisation (6 semaines)

- Généralités sur la cristallisation, la recristallisation, la sursaturation, la surfusion, la précipitation, la relation entre précipitation et cristallisation, la qualité d'un cristal. Modes de la Cristallisation : Transition de phase (transformations par diffusion, transformations sans diffusion), cristallisation à partir d'une solution.
- Modes de la Cristallisation : transition de phase (liquide → solide ; gaz → solide ; solide amorphe → solide cristallisé), cristallisation à partir d'une solution (par refroidissement, par évaporation, par relargage, etc.).
- Germination (ou nucléation) : définition, types de germination (homogène ou primaire et hétérogène ou secondaire, vitesse de germination, mécanismes de la germination (primaire et secondaire), conditions d'apparition et de stabilité des germes sphériques.
- Croissance cristalline : Définition, vitesse critique, aspect thermodynamique et énergétique.
- Aspects thermodynamiques et énergétiques (transition de la phase mère et énergie interne du système de phases).
- Habitus et faciès d'un cristal,
- Aspect dynamique (agglomération orientée, instabilités dendritiques)

3. Théories de la croissance cristalline (5 semaines)

- Théories concernant la structure (Croissance comme phénomène capillaire : loi de Curie, Vitesse de croissance des faces comme facteur déterminant la forme, Méthode des sphères cristallines, Vitesse de dissolution des faces, Approche thermodynamique de Gibbs, Théorème de Wulff, Théorie de Hartmann et Perdok, Croissance et diffusion, Croissance en rapport avec la structure (Loi de stratification multiple d'Haüy). Théories cinétiques, (Théories de Kossel-Stranski-Volmer, Mécanisme de croissance d'après Volmer, Théorie de Gilmer et Bennema (théorie la rugosité : Interface rugueuse et Interface lisse.), théorie de Frank.
- Mécanisme et vitesse de la croissance (Expressions de la vitesse de croissance, Description générale et étapes principales du mécanisme de croissance.

4. Facteurs influençant la croissance des cristaux (4 semaines)

- Solvant, additifs et impuretés,
- Taille des cristaux, température, transport (diffusion, convection),
- Surface : croissance par nucléation de surface bi- dimensionnelle (mécanisme polynucléaire, mécanisme de nucléation et d'étalement), dislocation.

5. Principales méthodes et techniques de croissance cristalline (8 semaines)

- À partir de l'état fondu : Procédé de Bridgman – Stockbarger, procédé de Czochralski,
- méthode Kyropoulos, méthode Stepanov, méthode EDFFG, procédé Verneuil, Procédé par zones flottantes, croissance par fusion d'arc,
- À partir de solvants (par refroidissement de la solution, par évaporation du solvant, par relargage, à partir d'une solution hydrothermale).
- Croissance par transport physique ou sublimation ;
- Croissance par transport chimique ; procédé CVT (chemical vapor transport) ou procédé CVD (chemical vapor deposition).
- Epitaxie (par jet moléculaire, en phase liquide, en phase vapeur), frittage, polymérisation, sédimentation, simple fusion et refroidissement rapide (fabrication des verres).

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- Jacques Villain, Alberto Pimpinelli : **Physique de la croissance cristalline** – 1999
- Daniel R. Neuville, Laurent Cormier, Daniel Caurant, Lionel Montagne : **Du Verre au Cristal : Nucléation, croissance et démixtion – De la recherche aux applications**

Semestre : 3

UE : Méthodologie

Matière : TP Modélisation des Matériaux

Objectifs de l'enseignement

Ce module pratique vise à initier les étudiants aux outils de simulation et de modélisation utilisés dans la science des matériaux. À travers une série de travaux pratiques, l'étudiant sera capable de manipuler des logiciels courants tels que LAMMPS, Quantum Espresso, OVITO, Materials Studio, Xcrysden, Wien2k, etc., et d'appliquer ces outils pour prédire et analyser les propriétés physiques, mécaniques et thermiques des matériaux.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé les bases de la physique des matériaux, les concepts fondamentaux de la chimie théorique et une initiation à la programmation ou aux outils scientifiques numériques.

Contenu de la matière :

1. Introduction aux outils de modélisation

- Manipulation de logiciels comme LAMMPS, OVITO, Materials Studio, Quantum Espresso, QE, Xcrysden, Wien2k, ...

2. Potentiel de Lennard-Jones

- Étude de l'interaction entre deux atomes

3. Simulation de dynamique moléculaire d'un cristal

- Calcul de la température, énergie potentielle/cinétique

4. Compression d'un cristal (calcul de module d'Young)

- Tracer courbe contrainte-déformation

5. Étude de la diffusion atomique

- Calcul du coefficient de diffusion à T variable

6. Introduction à la DFT

- Optimisation de structure, calcul d'énergie totale...

7. Structure de bande et densité d'états (DOS)

- Calcul et interprétation

8. Simulation thermique d'un matériau

- Calcul de la conductivité thermique

9. Étude d'une interface solide/liquide

- Modélisation d'un système hétérogène

10. Étude comparative entre simulation et données expérimentales

- Validation d'un modèle par une propriété mesurable (module, énergie, etc.)

Semestre 3

Intitulé de l'unité : Méthodologie

Intitulé de la matière : Exploration de logiciels libres et open source en Chimie des Matériaux

Objectifs de l'enseignement :

- Initier les étudiants à l'utilisation de logiciels open source pour la modélisation, la visualisation et la caractérisation des matériaux.
- Mettre en pratique des compétences en analyse structurale, simulation thermodynamique et modélisation atomique.
- Comprendre les outils de calcul et de traitement de données dans les domaines de la diffraction, spectroscopie, et des propriétés physico-chimiques.

Connaissances préalables recommandées :

- Bases en cristallographie, spectroscopie et thermodynamique.
- Connaissance de base en chimie des matériaux solides.
- Notions d'utilisation d'environnements Linux et logiciels scientifiques.

Programme pédagogique détaillé :

Chapitre I. Introduction aux logiciels open source en science des matériaux

- Avantages des outils open source
- Tour d'horizon des logiciels utilisés : VESTA, Avogadro, Thermo-Calc (version demo), LAMMPS, Phonopy, GDIS

Chapitre II. Visualisation et modélisation structurale

- Utilisation de VESTA et Avogadro pour la visualisation des structures cristallines et amorphes
- Construction de maille, modélisation de défauts cristallins
- Exportation et conversion de formats CIF/PDB/XYZ

Chapitre III. Analyse structurale et diffraction

- Analyse de diffraction des rayons X avec FullProf, GSAS-II
- Indexation, affinement de Rietveld
- Extraction de paramètres structuraux

Chapitre IV. Simulation de propriétés et calculs atomistiques

- Simulation de dynamique moléculaire avec LAMMPS (introduction)
- Notions de relaxation, maille supercellulaire, modélisation de l'énergie de cohésion
- Calculs de phonons avec Phonopy (thermodynamique des solides)

Chapitre V. Spectroscopie et traitement de données

- Traitement des données spectroscopiques FTIR, UV-Vis, Raman via Fityk, ORIGIN (alternatives libres : QtiPlot, SciDAVis)
- Extraction de pics, déconvolution

- Interprétation de données spectrales pour la caractérisation des matériaux

Chapitre VI. Mini-projet appliqué

- Projet individuel ou par binôme : modélisation, visualisation ou traitement de données d'un matériau donné
- Rapport illustré et soutenance présentielle

Références recommandées :

1. VESTA: <https://jp-minerals.org/vesta/en/>
2. Avogadro: <https://avogadro.cc/>
3. LAMMPS: <https://www.lammps.org/>
4. Phonopy: <https://phonopy.github.io/phonopy/>
5. GSAS-II: <https://subversion.xray.aps.anl.gov/pyGSAS/>
6. FullProf: <https://www.ill.eu/sites/fullprof/>
7. Fityk: <https://fityk.nieto.pl/>
8. QtiPlot: <https://www.qtiplot.com/>

Semestre : 3

UE : Méthodologie

Matière : TP Elaboration de Matériaux 2

Objectifs de l'enseignement

L'objectif de ce module pratique est de donner aux étudiants les bases nécessaires pour mieux comprendre les propriétés physiques et structurales des matériaux nanostructurés et en couches minces élaborés par électrodéposition, bain chimique et méthodes hydrothermales. À la fin de ce cours, l'étudiant sera capable de réaliser et analyser la synthèse de nanostructures à base de semi-conducteurs II-VI et d'oxydes métalliques dopés.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé les notions d'électrochimie, électrodéposition, techniques d'élaboration des couches minces, dépôt chimique en solution (CBD), ainsi que les principes d'épitaxie par jet moléculaire.

Contenu de la matière :

- 1. Elaboration par électrodéposition de couches minces à base de métaux de transition (Ni, Co, Fe)**
- 2. Élaboration par bain chimique des nanostructures à base des semi-conducteurs II-VI (ZnO-ZnS)**
- 3. Elaboration des nanostructures à base d'oxyde de zinc (ZnO) et d'oxyde de cuivre (Cu₂O) par électrodéposition.**
- 4. Dopage de (ZnO): ZnO:Al (AZO), ZnO:Mg (MGO), dopage de p-Cu₂O par Cl (n- Cu₂O)**
- 5. Synthèse de ZnO, Cu₂O, des hétérojonctions de p-Cu₂O/n-ZnO et de homojonctions p-Cu₂O/n-Cu₂O par électrodéposition et bain chimique**
- 6. Elaboration de couches minces de ZnS par la méthode de dépôt par bain chimique (CBD)**
- 7. Dopage de (ZnO): ZnO:Al (AZO), ZnO:Mg (MGO), dopage de p-Cu₂O par Cl (n- Cu₂O)**
- 8. Synthèse de ZnO, Cu₂O, des hétérojonctions de p-Cu₂O/n-ZnO et de homojonctions p-Cu₂O/n-Cu₂O par électrodéposition et bain chimique**
- 9. Elaboration hydrothermale des oxydes métalliques semiconducteurs**

Références : (Livres et photocopiés, sites internet, etc).

Semestre : 3

UE : Méthodologie

Matière : TP Caractérisation des Matériaux 2

Objectifs de l'enseignement

Ce module pratique vise à initier les étudiants aux techniques avancées de caractérisation des matériaux, notamment des oxydes conducteurs transparents et des nanostructures. À travers une série de travaux pratiques, l'étudiant sera capable d'utiliser des méthodes telles que la microscopie AFM, la diffraction des rayons X, les mesures optiques UV-VIS-NIR, ainsi que l'analyse Mott-Schottky pour évaluer les propriétés structurales, morphologiques, optiques et électriques des matériaux.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé les bases de la physique des matériaux, les principes de cristallographie, ainsi qu'une initiation aux méthodes de caractérisation physico-chimique.

Contenu de la matière :

1. Estimation de la concentration en porteurs de charges par Mott-Schottky

- Principe de la technique Mott-Schottky
- Mesure de la densité de porteurs
- Analyse des résultats sur des oxydes conducteurs transparents

2. Observation morphologique par microscopie à force atomique (AFM)

- Principe de fonctionnement de l'AFM
- Préparation des échantillons
- Analyse de la rugosité et topographie des surfaces
- Visualisation des structures nanométriques

3. Mesures optiques par UV-VIS-NIR

- Mesure du coefficient d'absorption et détermination du gap optique
- Mesure de la résistivité électrique
- Détermination de l'épaisseur des dépôts
- Interprétation des spectres obtenus

4. Caractérisation structurale par diffraction de rayons X (DRX)

- DRX appliqué aux oxydes conducteurs transparents (ZnO, Cu₂O)
- Identification des phases cristallines
- Analyse qualitative et quantitative des diagrammes de diffraction

5. Caractérisation structurale des nanostructures par diffraction de rayons-X (DRX)

6. Caractérisation de la photoactivité des oxydes métalliques transparents et semi-conducteurs

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

Semestre : 3

UE : Transversale

Matière : Capteurs et supercondensateurs électrochimiques

Objectifs de l'enseignement

L'objectif de cet enseignement est de fournir aux étudiants les bases scientifiques et techniques nécessaires à la compréhension du fonctionnement des capteurs chimiques et électrochimiques ainsi que des supercondensateurs. L'étudiant sera capable d'analyser les mécanismes réactionnels, les matériaux utilisés, les performances électrochimiques, et les applications industrielles dans les domaines de l'énergie et de la détection.

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir bien maîtrisé les notions fondamentales d'électrochimie, de chimie des matériaux et de physique des solides.

Contenu de la matière :

1. Introduction aux capteurs chimiques et électrochimiques (7 semaines)

- Principe de base de la détection électrochimique
- Types de capteurs : potentiométriques, ampérométriques, conductimétriques
- Électrodes de référence et indicateurs
- Nanomatériaux pour capteurs : graphène, nanotubes, oxydes métalliques, MOFs...
- Exemples d'applications : détection de gaz, ions, biomolécules, mesure du pH

2. Supercondensateurs électrochimiques (8 semaines)

- Principes fondamentaux des supercondensateurs
- Différences avec les batteries et les condensateurs classiques
- Types de stockage : double couche électrique (EDLC), pseudo-capacité, technologies hybrides
- Matériaux d'électrode : carbone actif, oxydes métalliques, polymères conducteurs
- Électrolytes : aqueux, organiques, ioniques
- Performances : densité d'énergie, densité de puissance, cyclabilité
- Applications : transports, stockage d'énergie renouvelable, microélectronique

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- Bard, A. J., Faulkner, L. R. : *Electrochemical Methods – Fundamentals and Applications*
- Conway, B. E. : *Electrochemical Supercapacitors – Scientific Fundamentals and Technological Applications*
- Gopel, W., Hesse, J., Zemel, J. N. : *Sensors: A Comprehensive Survey*
- Dunn, B., Kamath, H., Tarascon, J. M. : *Electrochemical Energy Storage for Green Energy Systems*
- Articles récents : *Electrochimica Acta*, *Advanced Materials*, *Sensors and Actuators B*

Semestre : 3

UE : Transversale

Matière : Entrepreneuriat, Innovation et Startup

Objectifs de l'enseignement

L'objectif de ce module est de former les étudiants aux fondamentaux de la gestion de projet et de les accompagner dans la création d'entreprises innovantes. À travers un format atelier en groupe, l'étudiant sera capable de :

- Maîtriser les méthodes et outils de gestion de projet (Gantt, Scrum, Business Model Canvas)
- Concevoir un plan d'affaires structuré et identifier les sources de financement (capital-risque, aides publiques)
- Développer un projet pratique (prototype ou startup) en équipe, avec une présentation orale et un pitch convaincant
- Adopter une démarche entrepreneuriale intégrant les enjeux de la gestion de projet et de l'innovation

Connaissances préalables recommandées

Il est recommandé d'avoir des bases générales sur la gestion de projet, ainsi qu'une culture scientifique et technique suffisante pour comprendre les liens entre innovation technologique et entrepreneuriat.

Contenu de la matière :

1. Fondements de l'entrepreneuriat (4 semaines)

- Définition de l'entrepreneuriat – création de valeur par l'innovation et la prise de risque
- Piliers de l'entrepreneuriat : opportunité, innovation, gestion du risque, création de valeur
- L'écosystème entrepreneurial : chercheurs-entrepreneurs, investisseurs, incubateurs, clusters
- Processus de création d'entreprise : idéation → validation → business plan → lancement → croissance
- Enjeux scientifiques et techniques : brevets, normes, financement R&D, travail en équipes pluridisciplinaires
- Cas pratiques : simulation de dépôt de brevet, recherche de financement

2. L'esprit entrepreneurial dans les sciences et technologies (3 semaines)

- Comprendre l'entrepreneuriat scientifique et technologique
- Esprit entrepreneurial : créativité, innovation, résilience, gestion du risque
- Motivations à entreprendre dans les domaines scientifiques et technologiques
- Grands secteurs d'opportunités : énergie, santé, matériaux, numérique, environnement, sciences alimentaires

3. De la recherche scientifique à l'opportunité entrepreneuriale (4 semaines)

- Transformer une découverte scientifique ou technologique en projet entrepreneurial
- Approche "problème-solution" : identification de besoins réels
- Initiation à l'étude de marché appliquée aux projets scientifiques
- Validation rapide d'une idée : prototype minimum viable (MVP), enquêtes, tests utilisateurs

4. Construire et modéliser son projet innovant (3 semaines)

- Introduction au Business Model Canvas (BMC) pour projets technologiques
- Définir une proposition de valeur claire et différenciante

- Identifier ressources, partenaires stratégiques, canaux de distribution

5. Lancer son projet scientifique ou technologique (4 semaines)

- Étapes clés pour passer de l'idée au projet structuré
- Sources classiques de financement en phase de démarrage : fonds d'amorçage, concours, soutiens privés
- Savoir pitcher : vulgariser une innovation pour convaincre investisseurs, partenaires et premiers clients
- Erreurs fréquentes à éviter : mauvaise évaluation du marché, développement technologique déconnecté du besoin réel

6. Réussir et se développer comme entrepreneur scientifique (4 semaines)

- Gestion du risque et de l'incertitude dans les projets innovants
- Stratégies de pivot : adapter son projet selon les retours du marché
- Leadership scientifique : organiser et animer une équipe pluridisciplinaire
- Bases de propriété intellectuelle : brevets, licences, valorisation de l'innovation
- Entrepreneuriat à impact : répondre aux défis environnementaux, sociaux et économiques
- Continuer à progresser : réseaux d'innovation, incubateurs, mentors, formations continues

Références (Livres et photocopiés, sites internet, etc.) :

- Verstraete, Thierry, Fayolle, Alain : *Entrepreneuriat – Fondements et dynamiques* – De Boeck Supérieur, 2005
- Julien, Pierre-André : *Entrepreneuriat – Devenir entrepreneur : théories et pratiques* – Économica, 2007
- Schieb-Bienfait, Nathalie, Lemoine, Valérie : *Entrepreneuriat – Théories et réalités entrepreneuriales* – EMS, 2013
- Fayolle, Alain : *Entrepreneuriat – Apprendre à entreprendre* – Dunod, 2014
- PMI (Project Management Institute): *A Guide to the Project Management Body of Knowledge (PMBOK® Guide)* – 7th édition, 2021
- Olivier Ezratty : *Guide des startups* – édition annuelle gratuite
- Steve Blank : *The Startup Owner's Manual: The Step-by-Step Guide for Building a Great Company* – K&S Ranch, 2012