

## RESUME DESCRIPTIF DE LA CERTIFICATION (FICHE REPERTOIRE)

### Intitulé

Master – Domaine : Sciences, Technologies, Santé – Mention : Chimie – Spécialité :  
Chemoinformatique et modélisation

Autorité responsable de la certification	Qualité du(es) signataire(s) de la certification
Université de Strasbourg Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche	Président de l'Université de Strasbourg, Strasbourg Recteur Chancelier des universités

### Niveau et/ou domaine d'activité

Niveau : I

Code NSF : 110 - Spécialités pluriscientifiques

### Résumé du référentiel d'emploi ou éléments de compétences acquis

Fonctions visées:

modélisateur en chimie, chimie-physique et chimie thérapeutique; ingénieur d'études et développement de produits en chimie; architecte et administrateur de chimiothèques (bases de données en chimie); ingénieur système pour les infrastructures informatiques en chimie; analyste-programmeur de logiciels scientifiques pour la chimie; administrateur de site internet pour la chimie; support technique informatique et logiciel pour la chimie.

Compétences ou capacités évaluées

- utiliser les outils spécifiques de la chimie informatique
  - gestion, utilisation, création, annotation des bases de données relationnelles en chimie et biochimie
  - utilisation des codes de "modélisation moléculaire" et de calculs quantiques
  - connaissances en chimie thérapeutiques et stratégies de "drug design"
  - relations structure-propriété
  - chimie combinatoire théorique
  - criblage virtuel
  - gestion de projet en chimie informatique
  - fouille de données (data mining).
  - interfaces, accès et partage des chimiothèques virtuelles
- comprendre et interpréter les phénomènes physicochimiques mis en jeu au niveau moléculaire
- connaître et mettre en oeuvre les principes généraux de chimie thérapeutiques et des stratégies de "drug design"
- maîtrise des principales techniques physico-chimiques d'analyse et de mesures de propriétés physiques afin de permettre une analyse critique des résultats des outils théoriques et des logiciels informatiques.
- gérer des projet en chimie informatique pour la recherche et le développement de nouveaux médicaments, de nouvelles molécules pour le secteur agro-alimentaire et cosmétique, de nouveaux matériaux et de nouveaux produits pour la chimie fine et industrielle

- énumérer une chimiothèque virtuelle à partir des méthodes de chimie combinatoire
- évaluer qu'un produit est conforme à la réglementation à l'aide des moyens informatiques autorisés
- lire et écrire des programmes dans des langages impératifs et objets
- utiliser des langages interprétés et écrire des scripts
- développer des sites et des applications internet
- gérer, créer et annoter des bases de données
- gérer, administrer un système informatique

### Secteurs d'activité ou types d'emplois accessibles par le détenteur de ce diplôme, ce titre ou ce certificat

#### Secteurs d'activités

- industrie chimiques et pharmaceutiques
- informatique comme programmeur
- haute-technologie
- informatique industrielle
- recherche académique.

#### Types d'emplois accessibles

- modélisateurs (chimie, biologie, docking, génomique, "modélisation moléculaire", calcul de structure et dynamique)
- concepteur de bases de données chimiques ou de criblage virtuel
- analystes de chimiothèques
- programmeur

Préparation d'une thèse de doctorat dans le domaine de la chemoinformatique, modélisation moléculaire et chimie théorique

Codes des fiches ROME les plus proches (5 au maximum) :

H1206  
K2402  
M1805  
M1801

## Modalités d'accès à cette certification

### Descriptif des composantes de la certification :

La certification Master en Chimie Spécialité Chemoinformatique de l'Université de Strasbourg comporte les enseignements suivants:

Semestre 1: TP de synthèse; TP de chimie physique et analytique; TP de modélisation; chimie organique (anglais disciplinaire); chimie inorganique; cinétique et thermodynamique; spectroscopie - introduction; modélisation moléculaire; méthodes statistiques; systèmes d'exploitation et réseaux; mathématique pour la chimie.

Semestre 2: Programmation Impérative; Génie Logiciel; Langages Interprétés; Langage Orienté Objet; Bases de Données; TP de Programmation; Projet Encadré.

Semestre 3: Chemoinformatique I; Chemoinformatique II; Diversité Chimique In Silico; Méthodes de Fouille de Données; Technologies Internet; Drug Design; Biologie Structurale et Modélisation (anglais disciplinaire); Simulations Moléculaires; Chimie Quantique; UE Professionnelle

Semestre 4: UE Professionnelle; Stage

Le semestre 1 est mis en commun avec les spécialisations en Chimie-Physique-Analytique-Matériaux du master de Chimie. Le semestre 2 est partagé avec les enseignements de la composante Mathématiques et Informatiques de l'Université de Strasbourg. Le semestre 3 partage des enseignements avec la spécialisation In Silico Drug Design et avec la Chimie-Physique.

### Modalités de contrôle des compétences :

- Un semestre est validé si la moyenne est supérieure ou égale à 10 et si pour aucune UE, la note correspondante n'est strictement inférieure à la note minimale requise.
- Les UE dont la moyenne est supérieure ou égale à 10 sont acquises définitivement. Il n'est pas possible de passer les épreuves de seconde session des matières les constituant.
- La note minimale requise pour une UE fondamentale est 7. Il n'y a pas de note minimale requise pour une UE non-fondamentale. La liste des UE fondamentales est indiquée dans les descriptifs des parcours. Cette liste peut être modifiée après proposition auprès du Comité de Pilotage Pédagogique et après le vote de la Commission Pédagogique.
- Il n'est pas possible de refuser une compensation, que ce soit au niveau du semestre ou au niveau d'une UE.
- Les résultats de seconde session se substituent toujours à ceux de la première.
- Une UE dont la note est inférieure à 10 est non-acquise à titre individuel, mais acquise par compensation au sein d'un semestre. Un semestre correspond ainsi à la validation indivisible d'un total de 30 ECTS. La mention "Non-Acquis" accompagne dans un bulletin de note, toutes les UEs dont la note est inférieure à 10.
- Si un semestre n'est pas validé, la seconde session est obligatoire pour toutes les matières d'une UE non validée dont le résultat est inférieur à 10. Les notes supérieures à 10 des matières de cette UE sont reportées en seconde session sans possibilité de renonciation. Cela s'applique aux UEs inférieures à 10/20. Cela s'applique également lorsqu'un étudiant a obtenu 10/20 ou plus au semestre mais est ajourné car au moins pour une UE fondamentale, la note minimale requise n'a pas été atteinte.
- Il en résulte que c'est la notion d'UE qui domine. Quand une UE est validée par note ou par compensation, c'est définitif.

Le bénéfice des composantes acquises peut être conservé sans limite dans le temps

Conditions d'inscription à la certification	Oui	Non	Indiquer la composition des jurys
Après un parcours de formation sous statut d'élève ou d'étudiant	X		
En contrat d'apprentissage		X	
Après un parcours de formation continue	X		
En contrat de professionnalisation		X	
Par candidature individuelle	X		Possible pour partie du diplôme par VES ou VAPP
Par expérience	X		Enseignants-chercheurs et professionnels

Liens avec d'autres certifications	Accords européens ou internationaux

### Base légale

Référence arrêté création (ou date 1er arrêté enregistrement) :

Master : Arrêté du 25 avril 2002 publié au JO du 27 avril 2002

N° d'habilitation : xxxxxxxx  
Date d'habilitation : xx/xx/xxxx

Références autres :

### Pour plus d'information

Statistiques :

Site de l'Observatoire régional de l'enseignement supérieur et de l'insertion professionnelle des étudiants (ORESIFE) : <http://www.unistra.fr/index.php?id=102>

Autres sources d'informations :

Site de l'Université de Strasbourg : <http://www.unistra.fr>

Site de la composante : [www-chimie.u-strasbg.fr](http://www-chimie.u-strasbg.fr)

Lieu(x) de certification :

Faculté de chimie

1 rue Blaise Pascal

67008 Strasbourg Cedex

Tél. : 03 68 85 17 16

Courriel : [scolarite@chimie.unistra.fr](mailto:scolarite@chimie.unistra.fr)

Lieu(x) de préparation à la certification déclaré(s) par l'organisme certificateur :

Université de Strasbourg

4 rue Blaise Pascal

CS 90032

F-67081 Strasbourg cedex

**Liste des liens sources**

Site Internet de l'autorité délivrant la certification

<http://www.unistra.fr>