

Share



Email destinataire :

Vous devez renseigner un email valide

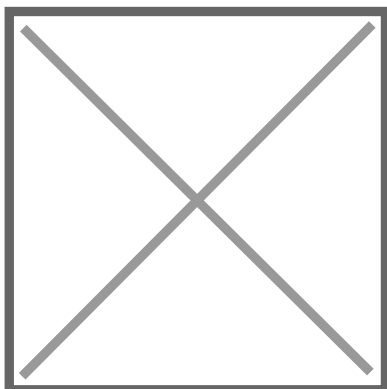
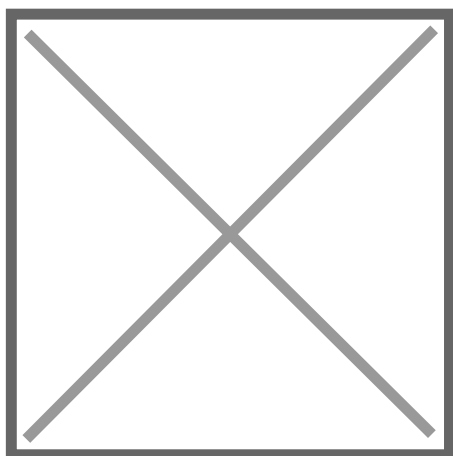
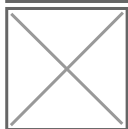
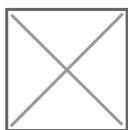
Envoyer

Une erreur est survenue. Merci de réessayer ultérieurement

Le mail de partage a bien été envoyé.

Add to Compare

M1 Functional Materials



Master's degree

Specialisation Materials Science and Engineering

Enrolment type

Full-time academic programmes Life-long learning

Language(s) of instruction

French

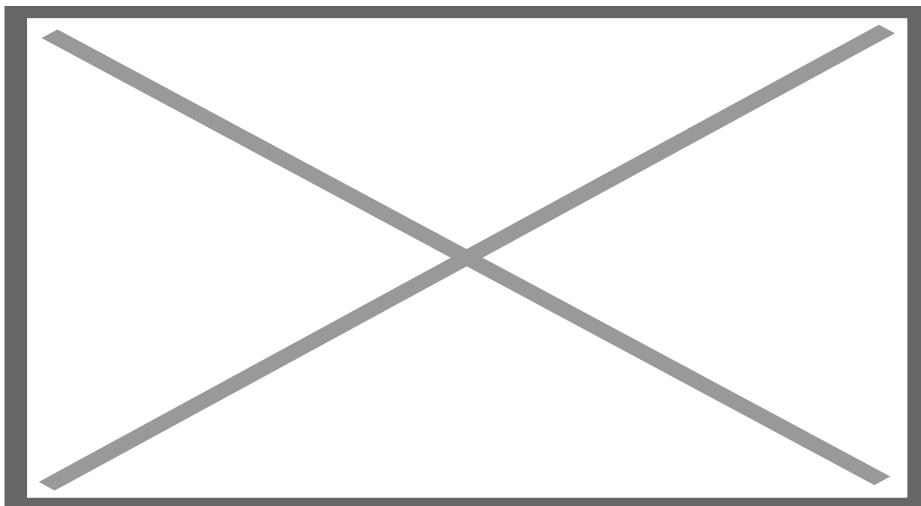
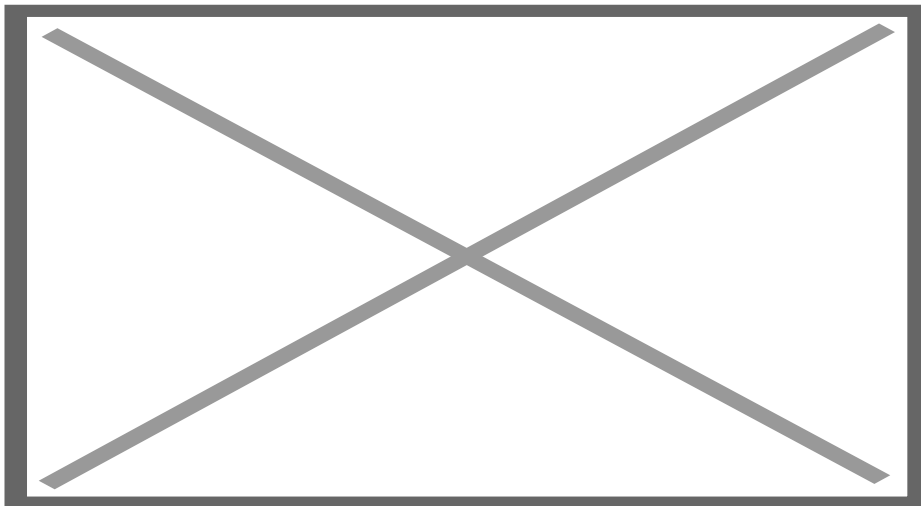
The M1 Functional Materials program provides a rigorous and dynamic education in materials science, combining an experimentally driven approach for the Functional Materials and Applications track with a computational focus for the Computational Materials Science track. It equips students with a strong and comprehensive foundation in theoretical and practical knowledge, encompassing material classes, characterization techniques, and functional properties.

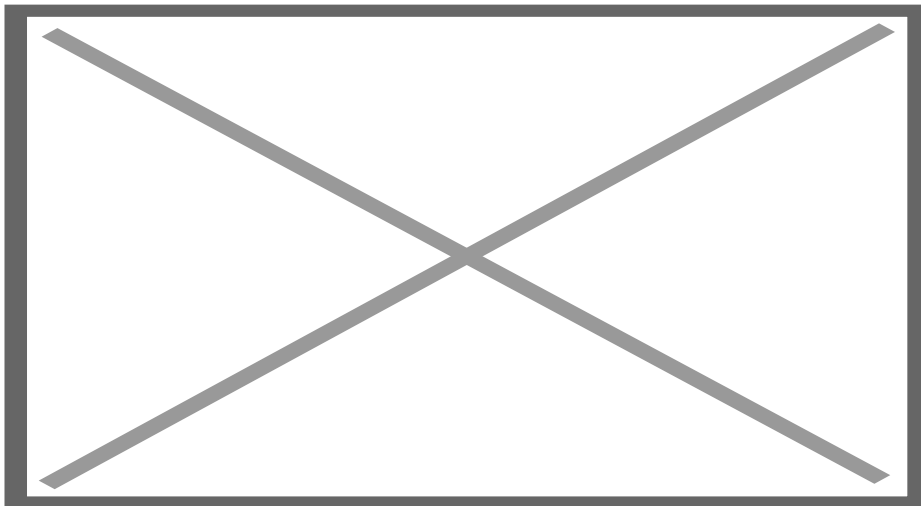
The M1 Functional Materials is a graduate program offering two complementary pathways Functional Materials and Applications (FMA) and Computational Materials Science (CMS).

Both pathways provide a solid foundation in materials science, covering a broad spectrum of skills, from the chemistry and physics of materials to their functional properties and advanced characterization techniques. The FMA pathway is experimentally focused, combining theoretical knowledge with hands-on training on state-of-the-art laboratory platforms. The CMS pathway is unique in France, bridging solid-state physics, chemistry, and scientific computing, enabling students to develop expertise in Python programming, artificial intelligence, and advanced multi-scale modeling at the electronic and atomic levels.

[Télécharger la fiche détaillée](#)

[Apply Now](#)





Information

- [Overview](#)
- [Application requirements](#)
- [Schedule](#)

Présentation

Skills

Upon completing the *Functional Materials and Applications (FMA)* track, students will be able to:

- Master the structure–property relationships of different classes of materials.
- Understand particle–matter and photon–matter interactions for material characterization and select appropriate characterization methods.
- Apply computing tools in the field of materials science.
- Synthesize, format, and present scientific results in a clear and rigorous manner.
- Contribute to or lead a scientific project within a collaborative team.

Upon completing the *Computational Materials Science (CMS)* track, students will be able to:

- Master fundamental concepts in solid-state physics and chemistry.
- Program efficiently for scientific computing in Python.
- Manage and exploit databases and process large datasets using artificial intelligence (AI and Big Data).
- Perform simulations at electronic and atomic scales.
- Utilize professional databases and process large datasets using artificial intelligence (AI) and big data modeling and simulation software (VASP, Quantum Espresso, LAMMPS).
- Integrate scientific and computational knowledge to solve complex problems in research and industry.
- Prepare for M2 SMC, with autonomy in designing and analyzing digital projects applied to materials.

Objectives

The **Functional Materials and Applications (FMA)** track is designed to provide students with a solid theoretical foundation and essential practical tools to master the field of materials science. It prepares students to adapt effectively to the evolving careers in materials science, whether in industry or academic research. The first year is intentionally generalist, offering broad disciplinary exposure and allowing students to freely choose their orientation in the second year (M2). The curriculum is organized around three main pillars:

- Structure–property relationships of materials;
- Characterization of materials’ structures and properties, with strong support from advanced teaching and research platforms;
- Applied computing in materials science.

By the end of the pathway, students will have acquired a comprehensive understanding of both the experimental and theoretical fundamentals of materials science. They can pursue a Master 2 focusing on materials physics and/or chemistry, or join materials science and engineering programs in leading engineering schools.

The **Computational Materials Science (CMS)** track trains specialists in a rapidly expanding field at the interface of physics, chemistry, and scientific computing. This program combines solid foundational knowledge with advanced practical skills, preparing students for Master 2 CMS, a PhD, or an industrial career.

Students first gain an in-depth understanding of solid-state physics and chemistry, then develop competencies in:

- Scientific programming (Python);
- Management and analysis of large datasets (Big Data);
- Artificial intelligence applications in materials science;
- Atomistic numerical modeling at the electronic and atomic levels.

Training is supported by the use of state-of-the-art tools, such as VASP, Quantum Espresso, and LAMMPS, which are widely employed in both academic research and industry.

The objectives are the following:

- Build a strong foundation in materials science and scientific computing;
- Develop advanced skills in programming, database management, and AI;
- Master multi-scale modeling with professional software;
- Meet the increasing demand for numerical simulation expertise in academic and industrial environments.

Débouchés

Further Study Opportunities

Engineering school

Students in this track can turn to research at the end of the 2nd year Master's.

Calendar

Start of programme (indicative date)

01/09/2026

Admission

Admission Route

Physics

Chemistry

Physics, Chemistry

Science and Technology

Capacity

Available Places

Target Audience and Entry Requirements

The program is open to students holding a bachelor's degree in Physics, Chemistry, or Materials Science, or at the interface of these disciplines. For non-French-speaking applicants, a minimum B2 level in French is strongly recommended.

The *Computational Materials Science (CMS)* track is specifically designed for students who wish to develop advanced skills in numerical simulation, artificial intelligence, and materials modeling. Applicants should have a solid grasp of fundamental concepts in physics and chemistry, strong applied mathematics knowledge, and possess basic programming and computing skills. Scientific curiosity, analytical rigor, and the ability to work on complex multidisciplinary projects are also essential.

Période(s) de candidature

Inception Platform

From 15/01/2026 to 16/03/2026

From 19/06/2026 to 25/06/2026

Supporting documents

Compulsory supporting documents

Motivation letter.

All transcripts of the years / semesters validated since the high school diploma at the date of application.

Curriculum Vitae.

Detailed description and hourly volume of courses taken since the beginning of the university program.

Additional supporting documents

Certificate of French (compulsory for non-French speakers).

VAP file (obligatory for all persons requesting a valuation of the assets to enter the diploma).

Supporting documents :

- Residence permit stating the country of residence of the first country

- Or receipt of request stating the country of first asylum
- Or document from the UNHCR granting refugee status
- Or receipt of refugee status request delivered in France
- Or residence permit stating the refugee status delivered in France
- Or document stating subsidiary protection in France or abroad
- Or document stating temporary protection in France or abroad.

Programme

Matériaux Fonctionnels et Applications

Socle scientifique matériaux

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class
Physique du solide	5	Semestre 1	22	20				

Subjects	ECTS Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class
■							

Physique du solide

ECTS : 5

Semester: Semestre 1

Detail

Lecture: 22

Directed study: 20

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Notions de base en physique, outils mathématiques (Géométrie analytique, calcul vectoriel, éléments de calcul différentiel).

Programme/contents

- Rappels de Mécanique Quantique
- Introduction-Motivations à la Physique des Solides
- Électrons dans les solides
- Influence du potentiel périodique – structure électronique de bandes
- Structure électronique de bandes, calculs modernes
- Atomes et réseaux périodiques
- Aperçu des matériaux du futur et enjeux de la recherche autour des matériaux

Learning objectives

Les buts de cette UE seront de décrire et comprendre la structure périodique des solides et les propriétés électroniques de bandes. Introduction aux calculs modernes, aux méthodes expérimentales modernes, et aperçus des enjeux de la recherche actuelle du domaine.

Skills

- Méthodes simples de calculs électroniques
- Savoir utiliser les outils théoriques pour l'identification, à partir des données expérimentales, de la structure cristalline d'un matériau
- Apprendre à relier les propriétés microscopiques avec les propriétés macroscopiques des matériaux
- Apprendre les éléments de base du calcul et de l'interprétation de la structure électronique de bandes des solides

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class
Structure des solides : cristallographie, diffraction X et microscopie électronique	5	Semestre 1	18	18				

Subjects	ECTS Semester	Lecture directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class
----------	---------------	------------------------	-----------------	------------------------	-------------------------	--------------------------------

■

Structure des solides : cristallographie, diffraction X et microscopie électronique

ECTS : 5

Semester: Semestre 1

Detail

Lecture: 18

Directed study: 18

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Notions de base d'algèbre linéaire, opérations des matrices,

Programme/contents

Première partie :

Après une introduction à la cristallographie "géométrique" la description de la symétrie périodique est revue avec principalement la compréhension des notions de de classe cristalline, les notations de groupe d'espace, symétrie de site, espace réciproque, sphère d'Ewald. La détermination de la structure cristalline par diffraction X est abordée avec un descriptif des techniques expérimentales courantes.

Seconde partie :

nous chercherons à établir des liens entre les différentes présentations faites aux étudiants du réseau réciproque (physique du solide, diffraction X, diffraction électronique). Les cours dispensés, associés à des travaux dirigés, traitent de l'analyse cristallographique de différents matériaux (nanoparticules ou alliages métalliques) et des techniques de microscopie électronique associées à ces études (imagerie champ clair, champ sombre, HAADF, mode STEM, haute résolution et diffraction X). Les outils mathématiques indispensables (transformée de Fourier) sont rappelés et mis en œuvre au travers d'exercices.

Learning objectives

Ce cours a pour objectif l'initiation à la caractérisation structurale des solides organisés par l'utilisation de techniques de diffraction de rayons X, et à comprendre

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class
Thermodynamique et cinétique à l'état solide	3	Semestre 1	12	12				

Thermodynamique et cinétique à l'état solide

ECTS : 3

Semester: Semestre 1

Detail

Lecture: 12

Directed study: 12

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Connaissances de bases en chimie, chimie du solide, cristallographie, thermodynamique chimique (Energies libres, potentiel chimique), outils mathématiques (équations différentielles, transformées de Fourier, loi binomiale)

Programme/contents

Première partie :

Les fonctions thermodynamiques liées à la stabilité des différentes phases sont étudiées. On voit comment un diagramme de phases peut être calculé grâce à ces fonctions thermodynamiques. Enfin, on introduira comment, inversement, on peut modéliser un diagramme de phases ce qui permet la constitution de bases de données thermodynamiques (méthode Calphad). L'application de ces bases de données au développement de matériaux sera décrite brièvement.

2e partie :

Etude des phénomènes de transport de matière dans les solides qui sont à l'origine du vieillissement, des transformations de phase et de la réaction d'un système à un environnement extérieur. L'accent est mis sur les changements d'échelle pour lier les approches phénoménologiques à l'échelle macroscopique et les mécanismes de diffusion à l'échelle atomique. Les simulations numériques Monte Carlo à l'échelle atomique sont également présentées lors d'une séance de TP informatique. Les exemples traités dans le cours concernent les métaux, mais les mécanismes élémentaires et les méthodes présentées sont adaptables à d'autres classes de matériaux.

Learning objectives

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class
Electromagnétisme, magnétisme et matériaux	3	Semestre 1	12	12				
■								

Electromagnétisme, magnétisme et matériaux

ECTS : 3

Semester: Semestre 1

Detail

Lecture: 12

Directed study: 12

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Notions de base en physique, outils mathématiques

Programme/contents

Interaction électrostatique, champ et potentiel électrostatique, théorème de Gauss, énergie électrostatique, équations locales de l'électrostatique, propriétés des conducteurs, courants quasistationnaires, champ et force magnétique, loi de Laplace, champ magnétique créé par des courants permanents, théorème d'Ampère, équations locales de la magnétostatique, travail des forces magnétiques, phénomènes d'induction électromagnétique, équations de Maxwell, ondes électromagnétiques dans le vide. Milieux diélectriques. Milieux aimantés.

Learning objectives

Description quantitative des phénomènes électriques et magnétiques dans le vide et dans le milieu.
Consolider les connaissances d'électromagnétisme pour faciliter la compréhension des méthodes d'analyse des matériaux.

Type of assessment

Evaluation Continue non Intégrale

Composites et métamatériaux	2	Semestre 1	11	3	4
---	---	------------	----	---	---

Composites et métamatériaux

ECTS : 2

Semester: Semestre 1

Detail

Lecture: 11

Practical study : 4

Directed study: 3

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

notion de base de propriétés physico-chimiques des matériaux (y compris mécaniques), calculs mathématiques

Programme/contents

PARTIE I : Introduction aux matériaux hybrides

- Notion de matériau hybride et multiphasé.
- Apparition de matériaux hybrides et utilisation dans le temps

PARTIE II : Matériaux composites

- Notion de matériau composite et catégories de composites
- Techniques de fabrication de matériaux composites
- Propriétés effectives de matériaux composites et notion d'homogénéisation (modèles mean-field, volume élémentaire représentatif)
- Cas d'étude

PARTIE III : Matériaux architecturés et métamatériaux

- Notion de matériau architecturé et métamatériau
- Techniques de conception assistée par ordinateur et de fabrication innovante (impression 3D)

Travaux pratiques

Learning objectives

Acquérir des connaissances approfondies sur le développement de matériaux avancés hybrides et multi phasés, allant des procédés et techniques de caractérisation les plus innovants jusqu'à la modélisation de propriétés effectives

Enseignement général

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class	
Programmation avec Python	3	Semestre 1	8		24				



Programmation avec Python

ECTS : 3

Semester: Semestre 1

Detail

Lecture: 8

Practical study : 24

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Connaissances en analyse mathématique et en algèbre linéaire (UE Outils mathématiques pour les sciences des matériaux)

Programme/contents

Les cours théoriques et pratiques abordent les aspects fondamentaux de la programmation et du calcul scientifique, qui sont ensuite appliqués à des exemples concrets lors des travaux pratiques sur machine.

Le programme traite des bases des méthodes numériques en Python, des structures générales de la programmation (boucles, opérateurs logiques, structures de tableaux, fonctions) ainsi que de l'introduction aux bibliothèques les plus courantes utilisées pour le calcul scientifique et la visualisation des données, telles que math, NumPy et Matplotlib.

Il comprend également les notions fondamentales d'analyse mathématique (dérivées, intégrales), la résolution de systèmes linéaires et non linéaires, les équations différentielles du premier et du second ordre, ainsi que l'étude et l'application des transformées de Fourier.

Une initiation à la modélisation vient compléter l'enseignement afin d'illustrer les applications concrètes de ces outils dans différents domaines de la science des matériaux.

Learning objectives

L'objectif de cet enseignement est d'acquérir les bases des méthodes numériques permettant de résoudre des problèmes en mathématiques, en physique et en sciences des matériaux à l'aide du

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class
Anglais	3	Semestre 1						
■								

Anglais

ECTS : 3

Semester: Semestre 1

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Type of assessment

Evaluation Continue Intégrale

[Outils](#)

mathématiques pour la science des matériaux	3	Semestre 1	15	15	0
---	---	------------	----	----	---

Outils mathématiques pour la science des matériaux

ECTS : 3

Semester: Semestre 1

Detail

Lecture: 15

Practical study : 0

Directed study: 15

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Bases de mathématiques générales (algèbre, trigonométrie, fonctions), notions de physique générale (mécanique du point et du solide), bases du calcul différentiel et intégral

Programme/contents

Les notions abordées couvrent les bases de l'algèbre linéaire (calcul vectoriel, matrices, tenseurs, valeurs et vecteurs propres, diagonalisation), le calcul différentiel à plusieurs dimensions (intégrales multiples, champs vectoriels, analyse vectorielle), les équations différentielles du premier et du second ordre, ainsi que la transformée de Fourier et ses applications à l'étude des propriétés des matériaux.

L'objectif de cette UE est de fournir à l'étudiant.e les compétences mathématiques nécessaires à la modélisation et l'analyse quantitative des phénomènes étudiés dans les autres UEs.

Learning objectives

Cette UE présente les outils mathématiques fondamentaux nécessaires à la modélisation et à la compréhension des phénomènes physiques et chimiques rencontrés en science des matériaux.

Skills

- Maîtriser les bases de l'algèbre linéaire et du calcul vectoriel.
- Résoudre des équations différentielles à une ou plusieurs variables.
- Comprendre et appliquer les opérateurs de l'analyse vectorielle (gradient, divergence,

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/ c
Spectroscopies du solide	3	Semestre 2	12	12				

Spectroscopies du solide

ECTS : 3

Semester: Semestre 2

Detail

Lecture: 12

Directed study: 12

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

- Notions théoriques d'interaction rayonnement – matière
- Connaissances de base en optique et instrumentation (sources, lentilles, détecteurs)

Programme/contents

Introduction

- Intérêt fondamental et applicatif - contexte industriel
- Rayonnement, matière et interactions – Généralités

PARTIE I – Spectroscopies optiques

- Fondements des spectroscopies optiques.
- Principes, technologies et applications industrielles des spectroscopies optiques (en complément des travaux pratiques/projets) : absorption atomique, émission atomique, spectroscopie moléculaire d'absorption dans l'infra-rouge, diffusion Raman, spectroscopie moléculaire d'absorption dans l'UV-visible, spectroscopie d'émission de fluorescence.
- Effets de polarisation : dichroïsme linéaire et circulaire et polarisation de photoluminescence

PARTIE II - Spectroscopies électroniques

- Principes de la photoémission
- Fondements et applications de la Spectroscopie de Photoémission par Rayons X et UV (XPS, UPS) et des spectroscopies apparentées (Auger, Fluorescence X)
- Analyse chimique des surfaces
- Introduction à la photoémission résolue en angle (ARPES) : étude de la structure de bandes des matériaux

Learning objectives

Les processus d'interaction entre la matière et un

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	dir study/c
Chimie du Solide	3	Semestre 2	12	12				
■								

Chimie du Solide

ECTS : 3

Semester: Semestre 2

Detail

Lecture: 12

Directed study: 12

Tutored project 6

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Notions de base en chimie et en thermodynamique, outils mathématiques

Programme/contents

L'UE se déroule selon le plan suivant :

- Etat solide, cohésion et liaison
- Le cristal réel
- Structure-propriétés : matériaux fonctionnels.

Learning objectives

Cette UE vise à donner les bases de la chimie du solide, mais aussi à introduire la notion de relation structure-propriétés en se basant sur des exemples actuels qui conduisent au développement de nouvelles applications.

Overall organisation

Cette UE est constituée de cours et de TD, complétés par la réalisation d'un projet bibliographique à mener en groupe.

Bibliography

Chimie des solides, J. F. Marucco, EDP Sciences.

Type of assessment

Evaluation Continue non Intégrale

[Surfaces, interfaces /
Matériaux en couches
minces](#)

3	Semestre 2	9	12
---	------------	---	----

Surfaces, interfaces / Matériaux en couches minces

ECTS : 3

Semester: Semestre 2

Detail

Lecture: 9

Directed study: 12

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Notions de base en physique et en chimie, outils mathématiques.

Programme/contents

Après la définition des concepts (surface, interface, monocouche, épitaxie, substrat, adsorption etc.), les deux principales catégories de procédés de croissance de couches minces sont présentées : chimique et physiques à partir des vapeurs. Les similitudes et les différences entre différents procédés sont présentées et discutées. A titre d'exemple, le dépôt de couches minces par évaporation est détaillé jusqu'à estimer la vitesse de dépôt du film. A titre de comparaison, un autre procédé de la famille des dépôts physiques en phase vapeur (PVD) est introduit, la pulvérisation cathodique.

Learning objectives

Cette UE introduit les concepts fondamentaux pour comprendre la croissance des couches minces et les procédés afférents.

Type of assessment

Evaluation Continue non Intégrale

Nanomatériaux	3	Semestre 2	12	6
-------------------------------	---	------------	----	---

Nanomatériaux

ECTS : 3

Semester: Semestre 2

Detail

Lecture: 12

Directed study: 6

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Connaissances en mécanique quantique, physique et chimie des solides (UEs Physique du solide, Chimie du solide), mécanique, oscillateurs, interaction moléculaire, résistances des matériaux, calcul différentiel et intégral, optique, électronique de mesure

Programme/contents

L'UE aborde les propriétés chimiques, mécaniques, optiques et magnétiques des nanomatériaux

Un accent particulier est mis sur les propriétés de surface, les états de surface et la densité d'états électroniques en fonction de la dimensionnalité (0D, 1D, 2D, 3D). L'enseignement explore également la structure électronique en fonction de la taille des nanostructures, ainsi que le rôle des liaisons pendantes (dangling bonds) dans la modification des propriétés locales.

La partie expérimentale introduit les principes et les applications de la microscopie à effet tunnel (STM) et de la microscopie à force atomique (AFM), outils essentiels pour l'observation et la caractérisation des surfaces à l'échelle atomique.

Learning objectives

Cet enseignement propose une introduction approfondie aux nanosciences et aux nanotechnologies, ainsi qu'à l'étude du comportement de la matière aux petites échelles

Skills

- Utiliser les outils théoriques et expérimentaux appliqués à la caractérisation et à la modélisation de systèmes à l'échelle nanométrique.

- Développer une réflexion critique sur les enjeux

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	dir study/ c
Relations microstructure–propriétés et lois de comportement des matériaux	3	Semestre 2	12	12				

Relations microstructure–propriétés et lois de comportement des matériaux

ECTS : 3

Semester: Semestre 2

Detail

Lecture: 12

Directed study: 12

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Notions de base en physique et en chimie, outils
mathématiques

Programme/contents

Cette unité d'enseignement doit permettre aux étudiants de comprendre comment l'étude de la microstructure d'un matériau peut souvent permettre de comprendre sa réponse à des sollicitations extérieures, qu'elles soient mécaniques, magnétiques, électriques ou thermiques. Cette compréhension des mécanismes physiques locaux permet souvent de mieux décrire quantitativement le comportement macroscopique. Le cours s'intéressera au comportement mécanique, ferroélectrique et ferromagnétique. La description des principaux mécanismes d'endommagement et de fatigue sera aussi abordée. A l'issue de ce module, on attend que les étudiants soient familiarisés avec la notion de lois de comportement, y compris lorsque les matériaux sont soumis à des sollicitations multiphysiques.

Bibliography

Mécanique des matériaux solides, J. Lemaitre et J. L. Chaboche, Dunod. Des matériaux, J. P. Baillon et J. M. Dorlot, Presses Internationales Polytechnique. Matériaux - Ingénierie, science, procédé et conception, M. F. Ashby, H. Shercliff et D. Cebon, PPUR. Matériaux vol. 1 - Propriétés, applications et conception, M. F. Ashby et D. R. H. Jones, Dunod. Matériaux vol. 2 - Microstructures et procédés de mise en oeuvre, M. F. Ashby et D. R. H. Jones, Dunod.

Type of assessment

Evaluation Continue non Intégrale

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class
Modélisation en science des matériaux	3	Semestre 2	6		18			

Modélisation en science des matériaux

ECTS : 3

Semester: Semestre 2

Detail

Lecture: 6

Practical study : 18

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Notions de base en programmation informatique (langage Python) et en physique, outils mathématiques.

Programme/contents

Dans la première partie l'outil numérique sera utilisé pour le calcul de quantité physique des solides (capacité thermique, constante de Madelung...). Dans une deuxième partie, les méthodes de dynamique moléculaire et simulation Monte Carlo seront présentées et appliquées à des problèmes de la science de matériaux (optimisation structurale, calcul de quantités thermodynamiques...). Enfin, dans une troisième partie, l'approche de champ de phase qui permet de simuler le vieillissement des matériaux aux temps longs sera mise en œuvre selon une approche des milieux continus via la notion d'onde de concentration, en vue de calculer non seulement les microstructures dans l'espace réel mais aussi les diagrammes de diffractions X et de microscopie électronique

Learning objectives

L'objectif de cet enseignement est une présentation des bases de la simulation numérique pour la science des matériaux

Type of assessment

Evaluation Continue non Intégrale

Insertion professionnelle et projets

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class
Stage	8	Semestre 2						

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class	d
----------	------	----------	---------	----------------	-----------------	------------------------	-------------------------	--------------------------------	---

■

Stage

ECTS : 8

Semester: Semestre 2

Detail

Tutored project 25

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Type of assessment

Evaluation Continue Intégrale

[Travaux](#)

[pratiques sur](#)

[plateformes](#)

[instrumentales](#)

■

4 Semestre 2 40

Travaux pratiques sur plateformes instrumentales

ECTS : 4

Semester: Semestre 2

Detail

Practical study : 40

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Notions de base en physique et en chimie, outils mathématiques.

Learning objectives

Cette UE permet d'acquérir des compétences expérimentales par la mise en œuvre des connaissances acquises dans les autres UE en bénéficiant de l'accès à des appareils de plateformes de recherche.

Type of assessment

Evaluation Continue Intégrale

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class	d
Travail d'Initiative Personnelle à Thème	3	Semestre 2	18						
■									

Travail d'Initiative Personnelle à Thème

ECTS : 3

Semester: Semestre 2

Detail

Lecture: 18

Tutored project 18

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Notions de base en physique et en chimie.

Programme/contents

Le choix des thèmes se fera en tout début d'année pour que le projet puisse être mené jusqu'au départ en stage. Des points de suivi d'avancement des projets réguliers seront mis en place avec l'équipe pédagogique.

Cette UE vise à mettre en perspective l'ensemble des notions abordées tout au long de l'année de Master sur l'un des thèmes suivants :

- les nouveaux designs de matériaux ;
- l'acquisition et le traitement massif de données ;
- les matériaux bio-inspirés ;
- les méta-matériaux ;
- les matériaux et la gestion du patrimoine.

Learning objectives

Cette UE se déroule sous forme de projet en petits groupes mêlant recherche bibliographique et réalisation d'une expérience en relation avec les thèmes proposés. Les expériences pourront être faites en laboratoire, à l'initiative des étudiants.

Type of assessment

Evaluation Continue Intégrale

Sciences des Matériaux Computationnelles

Socle scientifique matériaux

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class
Physique du solide	5	Semestre 1	22	20				

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class
■								

Physique du solide

ECTS : 5

Semester: Semestre 1

Detail

Lecture: 22

Directed study: 20

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Notions de base en physique, outils mathématiques (Géométrie analytique, calcul vectoriel, éléments de calcul différentiel).

Programme/contents

- Rappels de Mécanique Quantique
- Introduction-Motivations à la Physique des Solides
- Électrons dans les solides
- Influence du potentiel périodique – structure électronique de bandes
- Structure électronique de bandes, calculs modernes
- Atomes et réseaux périodiques
- Aperçu des matériaux du futur et enjeux de la recherche autour des matériaux

Learning objectives

Les buts de cette UE seront de décrire et comprendre la structure périodique des solides et les propriétés électroniques de bandes. Introduction aux calculs modernes, aux méthodes expérimentales modernes, et aperçus des enjeux de la recherche actuelle du domaine.

Skills

- Méthodes simples de calculs électroniques
- Savoir utiliser les outils théoriques pour l'identification, à partir des données expérimentales, de la structure cristalline d'un matériau
- Apprendre à relier les propriétés microscopiques avec les propriétés macroscopiques des matériaux
- Apprendre les éléments de base du calcul et de l'interprétation de la structure électronique de bandes des solides

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class
Structure des solides : cristallographie, diffraction X et microscopie électronique	5	Semestre 1	18	18				

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class
----------	------	----------	---------	----------------	-----------------	------------------------	-------------------------	--------------------------------

■

Structure des solides : cristallographie, diffraction X et microscopie électronique

ECTS : 5

Semester: Semestre 1

Detail

Lecture: 18

Directed study: 18

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Notions de base d'algèbre linéaire, opérations des matrices,

Programme/contents

Première partie :

Après une introduction à la cristallographie "géométrique" la description de la symétrie périodique est revue avec principalement la compréhension des notions de de classe cristalline, les notations de groupe d'espace, symétrie de site, espace réciproque, sphère d'Ewald. La détermination de la structure cristalline par diffraction X est abordée avec un descriptif des techniques expérimentales courantes.

Seconde partie :

nous chercherons à établir des liens entre les différentes présentations faites aux étudiants du réseau réciproque (physique du solide, diffraction X, diffraction électronique). Les cours dispensés, associés à des travaux dirigés, traitent de l'analyse cristallographique de différents matériaux (nanoparticules ou alliages métalliques) et des techniques de microscopie électronique associées à ces études (imagerie champ clair, champ sombre, HAADF, mode STEM, haute résolution et diffraction X). Les outils mathématiques indispensables (transformée de Fourier) sont rappelés et mis en œuvre au travers d'exercices.

Learning objectives

Ce cours a pour objectif l'initiation à la caractérisation structurale des solides organisés par l'utilisation de techniques de diffraction de rayons X, et à comprendre

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class
Thermodynamique et cinétique à l'état solide	3	Semestre 1	12	12				

Thermodynamique et cinétique à l'état solide

ECTS : 3

Semester: Semestre 1

Detail

Lecture: 12

Directed study: 12

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Connaissances de bases en chimie, chimie du solide, cristallographie, thermodynamique chimique (Energies libres, potentiel chimique), outils mathématiques (équations différentielles, transformées de Fourier, loi binomiale)

Programme/contents

Première partie :

Les fonctions thermodynamiques liées à la stabilité des différentes phases sont étudiées. On voit comment un diagramme de phases peut être calculé grâce à ces fonctions thermodynamiques. Enfin, on introduira comment, inversement, on peut modéliser un diagramme de phases ce qui permet la constitution de bases de données thermodynamiques (méthode Calphad). L'application de ces bases de données au développement de matériaux sera décrite brièvement.

2e partie :

Etude des phénomènes de transport de matière dans les solides qui sont à l'origine du vieillissement, des transformations de phase et de la réaction d'un système à un environnement extérieur. L'accent est mis sur les changements d'échelle pour lier les approches phénoménologiques à l'échelle macroscopique et les mécanismes de diffusion à l'échelle atomique. Les simulations numériques Monte Carlo à l'échelle atomique sont également présentées lors d'une séance de TP informatique. Les exemples traités dans le cours concernent les métaux, mais les mécanismes élémentaires et les méthodes présentées sont adaptables à d'autres classes de matériaux.

Learning objectives

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class
Electromagnétisme, magnétisme et matériaux	3	Semestre 1	12	12				

Electromagnétisme, magnétisme et matériaux

ECTS : 3

Semester: Semestre 1

Detail

Lecture: 12

Directed study: 12

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Notions de base en physique, outils mathématiques

Programme/contents

Interaction électrostatique, champ et potentiel électrostatique, théorème de Gauss, énergie électrostatique, équations locales de l'électrostatique, propriétés des conducteurs, courants quasistationnaires, champ et force magnétique, loi de Laplace, champ magnétique créé par des courants permanents, théorème d'Ampère, équations locales de la magnétostatique, travail des forces magnétiques, phénomènes d'induction électromagnétique, équations de Maxwell, ondes électromagnétiques dans le vide. Milieux diélectriques. Milieux aimantés.

Learning objectives

Description quantitative des phénomènes électriques et magnétiques dans le vide et dans le milieu.
Consolider les connaissances d'électromagnétisme pour faciliter la compréhension des méthodes d'analyse des matériaux.

Type of assessment

Evaluation Continue non Intégrale

Enseignement général

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class
----------	------	----------	---------	----------------	-----------------	------------------------	-------------------------	--------------------------------

<u>Programmation avec Python</u>	3	Semestre 1	8	24
--------------------------------------	---	---------------	---	----



Programmation avec Python

ECTS : 3

Semester: Semestre 1

Detail

Lecture: 8

Practical study : 24

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Connaissances en analyse mathématique et en algèbre linéaire (UE Outils mathématiques pour les sciences des matériaux)

Programme/contents

Les cours théoriques et pratiques abordent les aspects fondamentaux de la programmation et du calcul scientifique, qui sont ensuite appliqués à des exemples concrets lors des travaux pratiques sur machine.

Le programme traite des bases des méthodes numériques en Python, des structures générales de la programmation (boucles, opérateurs logiques, structures de tableaux, fonctions) ainsi que de l'introduction aux bibliothèques les plus courantes utilisées pour le calcul scientifique et la visualisation des données, telles que math, NumPy et Matplotlib.

Il comprend également les notions fondamentales d'analyse mathématique (dérivées, intégrales), la résolution de systèmes linéaires et non linéaires, les équations différentielles du premier et du second ordre, ainsi que l'étude et l'application des transformées de Fourier.

Une initiation à la modélisation vient compléter l'enseignement afin d'illustrer les applications concrètes de ces outils dans différents domaines de la science des matériaux.

Learning objectives

L'objectif de cet enseignement est d'acquérir les bases des méthodes numériques permettant de résoudre des problèmes en mathématiques, en physique et en sciences des matériaux à l'aide du langage Python

Overall organisation

[Anglais](#) 3 Semestre
1



Anglais

ECTS : 3

Semester: Semestre 1

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Type of assessment

Evaluation Continue Intégrale

[Outils](#)

[mathématiques](#) 3 Semestre 15 15 0
[pour la science](#)
[des matériaux](#)



Outils mathématiques pour la science des matériaux

ECTS : 3

Semester: Semestre 1

Detail

Lecture: 15

Practical study : 0

Directed study: 15

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Bases de mathématiques générales (algèbre, trigonométrie, fonctions), notions de physique générale (mécanique du point et du solide), bases du calcul différentiel et intégral

Programme/contents

Les notions abordées couvrent les bases de l'algèbre linéaire (calcul vectoriel, matrices, tenseurs, valeurs et vecteurs propres, diagonalisation), le calcul différentiel à plusieurs dimensions (intégrales multiples, champs vectoriels, analyse vectorielle), les équations différentielles du premier et du second ordre, ainsi que la transformée de Fourier et ses applications à l'étude des propriétés des matériaux.

L'objectif de cette UE est de fournir à l'étudiant.e les compétences mathématiques nécessaires à la modélisation et l'analyse quantitative des phénomènes étudiés dans les autres UEs.

Learning objectives

Cette UE présente les outils mathématiques fondamentaux nécessaires à la modélisation et à la compréhension des phénomènes physiques et chimiques rencontrés en science des matériaux.

Skills

- Maîtriser les bases de l'algèbre linéaire et du calcul vectoriel.
- Résoudre des équations différentielles à une ou plusieurs variables.
- Comprendre et appliquer les opérateurs de l'analyse vectorielle (gradient, divergence, rotationnel).
- Appliquer les transformées de Fourier à des signaux et champs physiques.

[Introduction à
l'intelligence
artificielle et
au big data
pour les
sciences des
matériaux](#)

2.5

Semestre 1 4

14



Introduction à l'intelligence artificielle et au big data pour les sciences des matériaux

ECTS : 2.5

Semester: Semestre 1

Detail

Lecture: 4

Practical study : 14

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

notions de base en algèbre linéaire, en physique et en chimie des matériaux ; langage python

Programme/contents

Le cours propose une brève histoire de l'IA et du Big Data : des débuts symboliques à l'apprentissage profond ainsi qu'une présentation des concepts fondamentaux : données, modèles, algorithmes, apprentissage supervisé et non supervisé et l'écosystème Big Data : bases de données, stockage, structuration et flux de données scientifiques. Finalement sont présentés des enjeux : éthique, IA générative et calcul haute performance pour la physique et science des matériaux en particulier.

Learning objectives

Cette UE introduit les principes fondamentaux de l'Intelligence Artificielle (IA) et du Big Data, avec un accent particulier sur leurs applications aux sciences physiques et des matériaux. L'objectif est d'acquérir une compréhension claire des concepts, outils et méthodes utilisés pour manipuler, visualiser et interpréter de grands ensembles de données scientifiques.

Overall organisation

Cet enseignement est complété par des séances de TP, organisés sous forme de notebooks Python interactifs : (i) Lecture et structuration de bases de données, (ii) Nettoyage et préparation des données et visualisation dans le big data (iii) Introduction au machine learning : régression, classification, clustering etc

Bibliography

<u>Bases,</u> <u>concepts et</u> <u>enjeux du</u> <u>Deep Learning</u>	2.5	Semestre 1	4	14
---	-----	---------------	---	----



Bases, concepts et enjeux du Deep Learning

ECTS : 2.5

Semester: Semestre 1

Detail

Lecture: 4

Practical study : 14

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

notions de base en algèbre linéaire, en physique et en chimie des matériaux ; langage python

Programme/contents

Les étudiants explorent les grandes familles de modèles : des réseaux convolutifs (CNN) utilisés pour l'analyse d'images aux réseaux de graphes (GNN) capables de représenter des structures atomiques, jusqu'aux transformeurs et aux grands modèles de langage (LLM) qui ouvrent la voie à l'IA générative. L'accent est mis sur la compréhension intuitive des concepts : comment un réseau apprend, comment il s'adapte et comment il peut révéler des régularités cachées dans les données scientifiques. Le but est de connaître les champs d'applications de chaque méthode.

Les TP et le mini-projet abordent la lecture/visualisation de données (CSV, HDF5) ; les réseaux de neurones (MLP) : construction d'un modèle simple (PyTorch/TensorFlow), fonctions de coût et optimisation, étude d'hyperparamètres, validation croisée et métriques, application à la régression de propriétés de matériaux ; les représentations structurées : introduction aux CNN (images) et GNN (graphes atomiques, pytorch-geometric), notions d'invariance et de représentation physique ; les modèles génératifs.

Learning objectives

Cette UE invite à un voyage au cœur de l'intelligence artificielle moderne, le deep learning. On y découvre comment les méthodes classiques d'apprentissage automatique ont évolué vers les réseaux de neurones profonds, qui transforment aujourd'hui la recherche scientifique.

Bibliography

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/
Spectroscopies du solide	3	Semestre 2	12	12				c

Spectroscopies du solide

ECTS : 3

Semester: Semestre 2

Detail

Lecture: 12

Directed study: 12

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

- Notions théoriques d'interaction rayonnement – matière
- Connaissances de base en optique et instrumentation (sources, lentilles, détecteurs)

Programme/contents

Introduction

- Intérêt fondamental et applicatif - contexte industriel
- Rayonnement, matière et interactions – Généralités

PARTIE I – Spectroscopies optiques

- Fondements des spectroscopies optiques.
- Principes, technologies et applications industrielles des spectroscopies optiques (en complément des travaux pratiques/projets) : absorption atomique, émission atomique, spectroscopie moléculaire d'absorption dans l'infra-rouge, diffusion Raman, spectroscopie moléculaire d'absorption dans l'UV-visible, spectroscopie d'émission de fluorescence.
- Effets de polarisation : dichroïsme linéaire et circulaire et polarisation de photoluminescence

PARTIE II - Spectroscopies électroniques

- Principes de la photoémission
- Fondements et applications de la Spectroscopie de Photoémission par Rayons X et UV (XPS, UPS) et des spectroscopies apparentées (Auger, Fluorescence X)
- Analyse chimique des surfaces
- Introduction à la photoémission résolue en angle (ARPES) : étude de la structure de bandes des matériaux

Learning objectives

Les processus d'interaction entre la matière et un

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	dir study/ c
Chimie du Solide	3	Semestre 2	12	12				
■								

Chimie du Solide

ECTS : 3

Semester: Semestre 2

Detail

Lecture: 12

Directed study: 12

Tutored project 6

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Notions de base en chimie et en thermodynamique, outils mathématiques

Programme/contents

L'UE se déroule selon le plan suivant :

- Etat solide, cohésion et liaison
- Le cristal réel
- Structure-propriétés : matériaux fonctionnels.

Learning objectives

Cette UE vise à donner les bases de la chimie du solide, mais aussi à introduire la notion de relation structure-propriétés en se basant sur des exemples actuels qui conduisent au développement de nouvelles applications.

Overall organisation

Cette UE est constituée de cours et de TD, complétés par la réalisation d'un projet bibliographique à mener en groupe.

Bibliography

Chimie des solides, J. F. Marucco, EDP Sciences.

Type of assessment

Evaluation Continue non Intégrale

[Relations](#)

microstructure–propriétés et lois de comportement des matériaux	3	Semestre 2	12	12
---	---	------------	----	----

Relations microstructure–propriétés et lois de comportement des matériaux

ECTS : 3

Semester: Semestre 2

Detail

Lecture: 12

Directed study: 12

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Notions de base en physique et en chimie, outils
mathématiques

Programme/contents

Cette unité d'enseignement doit permettre aux étudiants de comprendre comment l'étude de la microstructure d'un matériau peut souvent permettre de comprendre sa réponse à des sollicitations extérieures, qu'elles soient mécaniques, magnétiques, électriques ou thermiques. Cette compréhension des mécanismes physiques locaux permet souvent de mieux décrire quantitativement le comportement macroscopique. Le cours s'intéressera au comportement mécanique, ferroélectrique et ferromagnétique. La description des principaux mécanismes d'endommagement et de fatigue sera aussi abordée. A l'issue de ce module, on attend que les étudiants soient familiarisés avec la notion de lois de comportement, y compris lorsque les matériaux sont soumis à des sollicitations multiphysiques.

Bibliography

Mécanique des matériaux solides, J. Lemaitre et J. L. Chaboche, Dunod. Des matériaux, J. P. Baillon et J. M. Dorlot, Presses Internationales Polytechnique. Matériaux - Ingénierie, science, procédé et conception, M. F. Ashby, H. Shercliff et D. Cebon, PPUR. Matériaux vol. 1 - Propriétés, applications et conception, M. F. Ashby et D. R. H. Jones, Dunod. Matériaux vol. 2 - Microstructures et procédés de mise en oeuvre, M. F. Ashby et D. R. H. Jones, Dunod.

Type of assessment

Evaluation Continue non Intégrale

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	dir study/
Modélisation en science des matériaux	3	Semestre 2	6		18			c
■								

Modélisation en science des matériaux

ECTS : 3

Semester: Semestre 2

Detail

Lecture: 6

Practical study : 18

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Notions de base en programmation informatique (langage Python) et en physique, outils mathématiques.

Programme/contents

Dans la première partie l'outil numérique sera utilisé pour le calcul de quantité physique des solides (capacité thermique, constante de Madelung...). Dans une deuxième partie, les méthodes de dynamique moléculaire et simulation Monte Carlo seront présentées et appliquées à des problèmes de la science de matériaux (optimisation structurale, calcul de quantités thermodynamiques...). Enfin, dans une troisième partie, l'approche de champ de phase qui permet de simuler le vieillissement des matériaux aux temps longs sera mise en œuvre selon une approche des milieux continus via la notion d'onde de concentration, en vue de calculer non seulement les microstructures dans l'espace réel mais aussi les diagrammes de diffractions X et de microscopie électronique

Learning objectives

L'objectif de cet enseignement est une présentation des bases de la simulation numérique pour la science des matériaux

Type of assessment

Evaluation Continue non Intégrale

[DFT pour la structure électronique des matériaux](#)

3	Semestre 2	8	16
---	------------	---	----

DFT pour la structure électronique des matériaux

ECTS : 3

Semester: Semestre 2

Detail

Lecture: 8

Practical study : 16

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Programme/contents

La première partie présente les principes de la modélisation des matériaux à l'échelle atomique, en introduisant la théorie de la fonctionnelle de la densité, les exemples typiques de calculs ab initio, ainsi que l'évolution historique et les raisons du succès de cette approche dans la science des matériaux moderne.

La deuxième partie aborde la formulation à plusieurs corps de l'équation de Schrödinger, en détaillant les principaux concepts : interaction coulombienne, approximation des noyaux fixes (Born–Oppenheimer), approximation des électrons indépendants, principe d'exclusion de Pauli, et approximation du champ moyen. Ces notions conduisent à la présentation des équations de Hartree–Fock et des équations de Kohn–Sham, qui constituent le cœur de la DFT.

La troisième partie développe la théorie de la fonctionnelle de la densité elle-même : expression de l'énergie totale de l'état fondamental électronique, résolution auto-cohérente des équations de Kohn–Sham, approximation locale de la densité (LDA), et discussion des domaines d'applicabilité et des limites de la DFT dans la modélisation des matériaux.

Enfin, une partie pratique est consacrée à la modélisation des propriétés structurales et électroniques d'un cristal de silicium à l'aide du logiciel libre QUANTUM ESPRESSO (<https://www.quantum-espresso.org/>)

Learning objectives

Cet enseignement propose une introduction à la modélisation numérique des matériaux à partir des premiers principes, en mettant l'accent sur les fondements théoriques et les applications de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). L'objectif est de comprendre comment les propriétés électroniques, structurales et énergétiques des matériaux peuvent être prédites à partir des lois fondamentales de la

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	dir study/ c
Bases de thermodynamique statistique	4	Semestre 2	18	18	0			

Bases de thermodynamique statistique

ECTS : 4

Semester: Semestre 2

Detail

Lecture: 18

Practical study : 0

Directed study: 18

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

Thermodynamique classique macroscopique (fonctions et variables d'état, principes, potentiels thermodynamiques), bases de mécanique quantique, mécanique classique du point, notions de statistiques (probabilités, moyenne, variance)

Programme/contents

Présentation des fondements de la thermodynamique statistique et son application à l'étude des systèmes chimiques.

Les notions clés de la physique statistique sont introduites (ensembles, entropie statistique, distributions de Boltzmann, moyenne d'ensemble) et appliquées au calcul de grandeurs thermodynamiques.

Learning objectives

Cette UE présente les fondements de la thermodynamique statistique et son application à l'étude des systèmes chimiques. Les notions clés de la physique statistique sont introduites (ensembles, entropie statistique, distributions de Boltzmann, moyenne d'ensemble) et appliquées au calcul de grandeurs thermodynamiques.

L'objectif de cette UE est de fournir à l'étudiant.e les concepts nécessaires pour comprendre le lien entre la description microscopique d'un système et les observables macroscopiques.

Bibliography

- *Chimie Physique* : Peter W. ATKINS Editions de Boeck
- *Eléments de physique statistique* : Sylvie VAUCLAIR InterEditions
- *Physique statistique* : Bernard DIU, Claudine GUTHMANN, Danielle LEDERER, Bernard

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class	distance learning
Simulation numérique : projet tutoré à thèmes	4	Semestre 2		12					

Simulation numérique : projet tutoré à thèmes

ECTS : 4

Semester: Semestre 2

Detail

Directed study: 12

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Prerequisites

- Connaissances de base en sciences des matériaux, physique du solide et modélisation numérique ;
- notions en programmation scientifique (Python ou équivalent) ;
- ouverture souhaitée vers les méthodes de simulation et/ou d'apprentissage automatique.

Programme/contents

Les projets peuvent combiner plusieurs approches selon le thème choisi : modélisation atomistique ou mésoscopique, analyse de données, machine learning appliqué aux matériaux, ou encore approches expérimentales réalisées à l'initiative des étudiant·e·s.

Un travail bibliographique conséquent est attendu pour situer le projet dans son contexte scientifique, identifier les enjeux et les méthodologies pertinentes, et construire une problématique claire.

Les thèmes possibles incluent, à titre d'exemple :

- nouveaux designs de matériaux ;
- acquisition et traitement massif de données ;
- simulation numérique et apprentissage automatique pour les matériaux
- étude structurale et électronique de semiconducteurs
- simulation des défauts cristallins et de leurs effets sur les propriétés optiques ou électriques

Subjects	ECTS	Semester	Lecture	directed study	practical class	Lecture/directed study	Lecture/practical class	directed study/practical class	dista learn cou
Stage	7	Semestre 2		12					
■									

Stage

ECTS : 7

Semester: Semestre 2

Detail

Directed study: 12

Language(s) of instruction

Français

Remote teaching

non

Type of assessment

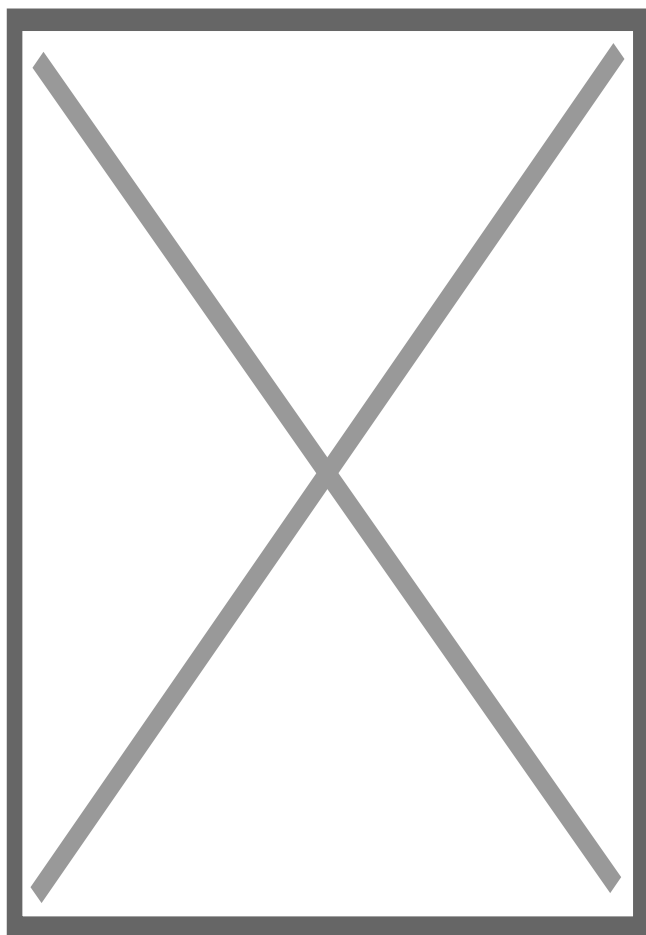
Evaluation Continue Intégrale

Teaching Location(s)

ORSAY

Training campus

Javascript est requis pour visualiser cette carte.



Saclay Moulon

Saclay / Gif-sur-Yvette / Orsay

Bus 4606 / 4609 / 4611 / 5154

RER B Le guichet

[Voir](#)

Student restaurant (CROUS)

Library

Sports facilities

Student residence

Contact

- **David BERARDAN**

Responsable EF PR1439

- **Michele AMATO**

Responsable M2 SMC

<http://www.universite-paris-saclay.fr/formation/master/sciences-et-genie-des-materiaux/m1-materiaux-fonctionnels>