

5.0 crédits	30.0 h + 30.0 h	2q
-------------	-----------------	----

Enseignants:	Charlier Jean-Christophe ; Gonze Xavier (coordinateur) ;
Langue d'enseignement:	Français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Thèmes abordés :	Présentation détaillée de techniques de simulations valides pour toutes les classes de matériaux (métaux, semi-conducteurs, céramiques, polymères). Par une série d'exercices orientés vers des matériaux réels, mise en application, grâce à l'outil informatique, des concepts développés dans les cours de Physique des matériaux.
Acquis d'apprentissage	Sur base de simulations numériques, l'étudiant apprend à étudier les matériaux aux échelles de taille et de temps caractéristiques des phénomènes électroniques et moléculaires. <i>La contribution de cette UE au développement et à la maîtrise des compétences et acquis du (des) programme(s) est accessible à la fin de cette fiche, dans la partie « Programmes/formations proposant cette unité d'enseignement (UE) ».</i>
Contenu :	<p>A. Présentation générale des méthodes de simulation (exemples motivant l'utilisation de techniques de simulation en science des matériaux ; présentation très brève mais assez exhaustive de diverses méthodes ; mise en place de divers concepts physiques concernés par les techniques algorithmiques et de visualisation, ainsi que les relations avec les données expérimentales)</p> <p>B. Simulations moléculaires classiques (potentiels d'interaction empiriques ou semi-empiriques ; dynamique moléculaire, recherche de l'état d'équilibre, dynamique amortie, simulation de l'ensemble canonique, thermostats)</p> <p>C. Simulations en liaisons fortes (paramétrisation semi-empirique de l'hamiltonien; algorithmes de résolution: diagonalisation, méthode de récursion)</p> <p>D. Simulations Ab Initio (introduction aux techniques Ab Initio ; éléments du formalisme de la fonctionnelle de la densité ; base d'ondes planes et pseudopotentiels ; algorithmes itératifs ; propriétés vibrationnelles)</p> <p>Méthodes : L'étudiant apprend à utiliser plusieurs programmes de simulation. Ensuite, il choisit un sujet, l'étudie, et rédige un rapport, qui constitue la majeure partie de l'évaluation.</p>
Autres infos :	MAPR 1491 (Compléments de physique) ou un cours équivalent. MAPR 1492 (Physique des matériaux) ou un cours équivalent.
Cycle et année d'étude :	> Master [120] : ingénieur civil électricien > Master [120] : ingénieur civil électromécanicien > Master [120] : ingénieur civil physicien > Master [120] : ingénieur civil en chimie et science des matériaux
Faculté ou entité en charge:	FYKI