





5.00 crédits	30.0 h + 30.0 h	Q2
--------------	-----------------	----

Enseignants	Charlier Jean-Christophe ;Gonze Xavier ;Rignanese Gian-Marco ;
Langue d'enseignement	Anglais > Facilités pour suivre le cours en français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Thèmes abordés	Exposé des techniques de simulation à l'échelle nanoscopique, basées sur la dynamique moléculaire classique, la méthode des liaisons fortes, la théorie de la fonctionnelle de la densité. Considérations de vitesse d'exécution, de précision numérique, de généralité des techniques, de limitations intrinsèques des techniques. Réalisation d'un projet de simulation numérique d'un matériau. Présentation orale et écrite de ce projet et des résultats, avec étude critique.
Acquis d'apprentissage	<p>A la fin de cette unité d'enseignement, l'étudiant est capable de :</p> <p>Contribution du cours au référentiel du programme Axe N°1 : 1.1, 1.2, 1.3 Axe N°3 : 3.1, 3.2 et 3.3 Axe N°4 : 4.1 Axe N°5 : 5.3, 5.4, 5.5 et 5.6 Axe N°6 : 6.1, 6.4</p> <p>Acquis d'apprentissage spécifiques au cours A l'issue de ce cours, l'étudiant sera en mesure :</p> <p>1</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. D'expliquer les principes de bases des techniques de simulations atomistiques et nanoscopiques, d'utiliser les logiciels qui les implémentent, de les comparer, et de faire son choix entre eux selon les propriétés qui doivent être simulées. 2. D'effectivement étudier les propriétés d'un matériau, y compris l'étude de la précision numérique des résultats et leur validation, notamment par la comparaison avec des résultats expérimentaux publiés, tout en portant un regard critique sur les résultats obtenus. 3. De rechercher des informations dans des publications scientifiques 4. De présenter et défendre son projet oralement 5. De rédiger un rapport sur leur projet et ses résultats y compris les points sus-mentionnés.
Modes d'évaluation des acquis des étudiants	Rédaction d'un rapport ; présentation orale ; discussion personnalisée avec les enseignants.
Méthodes d'enseignement	Enseignements magistraux, séances d'apprentissage devant console d'ordinateur, apprentissage par projet, discussion (évaluations formative et certificative) avec les tuteurs et enseignants.
Contenu	<p>Dans la première partie du cours, des enseignements magistraux sur les différentes techniques de simulations atomistiques et nanoscopiques alternent avec des séances d'exercices, réalisés sur ordinateurs, encadrés par des tuteurs. Certaines de ces séances d'exercices sont basés sur des tutoriels disponibles sur le Web.</p> <p>Dans la seconde partie du cours, les étudiants choisissent et réalisent un projet (individuel ou par groupe de deux) :</p> <ul style="list-style-type: none"> • ils sélectionnent un sujet d'étude, et l'exposent lors d'une séance commune (un tuteur est alors désigné pour leur encadrement personnel) ; • ils réalisent l'étude de ce sujet, en allant régulièrement consulter leur tuteur ; • ils présentent les résultats préliminaires lors d'une séance commune ; • ils préparent ensuite un pré-rapport, qui est discuté avec les titulaires lors d'une évaluation formative ; • ils remettent enfin le rapport, et le défendent lors de l'évaluation certificative finale.
Ressources en ligne	Moodle
Bibliographie	Disponibles sur Moodle : les directives, les transparents de support.

Autres infos	Ce cours suppose acquises les notions de base de sciences des matériaux, en physique quantique, en physique statistique, et en physique des matériaux dispensées en bac 2 et en bac 3 (par exemple, dans les cours LMAPR1805, LMAPR1491, et LMAPR1492), ainsi que des notions de base de programmation informatique (par exemple, dans le cours LEPL1401) et d'utilisation d'un PC.
Faculté ou entité en charge:	FYKI

Programmes / formations proposant cette unité d'enseignement (UE)				
Intitulé du programme	Sigle	Crédits	Prérequis	Acquis d'apprentissage
Master [60] en sciences physiques	PHYS2M1	5		
Master [120] : ingénieur civil en chimie et science des matériaux	KIMA2M	5		
Master [120] : ingénieur civil physicien	FYAP2M	5		
Master [120] en sciences physiques	PHYS2M	5		
Master de spécialisation en nanotechnologies	NANO2MC	5		