



[30h+15h exercices] 4 crédits

Cette activité se déroule pendant le 2ème semestre

Enseignant(s): Vincent Bayot, Patrick Bertrand, Jean-Christophe Charlier, Xavier Gonze (coord.), Luc Piraux
Langue d'enseignement : français
Niveau : cours de 2ème cycle

Objectifs (en terme de compétences)

Sur base de simulations numériques, étude des matériaux aux échelles de taille et de temps caractéristiques des phénomènes électroniques et moléculaires.

Synopsis

Présentation détaillée de techniques de simulations valides pour toutes les classes de matériaux (métaux, semiconducteurs, 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.

Objet de l'activité (principaux thèmes à aborder)

Contenu des cours

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)

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)

C. Simulations en liaisons fortes

(paramétrisation semi-empirique de l'hamiltonien; algorithmes de résolution: diagonalisation, méthode de récursion)

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)

E. Propriétés vibrationnelles et optiques : théorie et simulation

(Tenseur diélectrique, phonons, excitations électroniques, interaction photon-phonon, effets non-linéaires)

Autres informations (Pré-requis, Evaluation, Support, ...)

Prérequis

MAPR 2110 Introduction à la physique des matériaux

MAPR 2492 Physique des matériaux

Méthode

Cours magistral : exposé des concepts.

Séances d'exercices : 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.