

## Faculté de sciences appliquées



### MAPR2451 Etude des matériaux à l'échelle atomique

[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 :** Deuxième cycle

#### Objectifs (en termes 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)

#### Résumé : Contenu et Méthodes

Néant

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

##### Pré-requis

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.

**Autres crédits de l'activité dans les programmes**

<b>FSA13BA</b>	Troisième année de bachelier en sciences de l'ingénieur, orientation ingénieur civil	(4 crédits)
<b>MAP22</b>	Deuxième année du programme conduisant au grade d'ingénieur civil en mathématiques appliquées	(4 crédits)
<b>MATR22</b>	Deuxième année du programme conduisant au grade d'ingénieur civil en science des matériaux	(4 crédits)