



Simulation atomistique des matériaux



Niveau d'étude
BAC +5



ECTS
5 crédits



Structure de
formation
Faculté des
Sciences



Volume horaire
39h

En bref

- > **Méthodes d'enseignement:** En présence
- > **Forme d'enseignement :** Cours magistral
- > **Ouvert aux étudiants en échange:** Oui

Présentation

Description

Ce cours pose les bases pour se servir des outils de simulation 'atomistique', c'est-à-dire reposant sur les interactions microscopiques entre les constituants. Principalement, il pose les fondements pour les simulations dites 'Dynamique Moléculaire' et 'Monte Carlo'.

Il aborde les notions théoriques sous-jacentes, afin de construire une bonne compréhension des méthodes, ainsi que la mise en place pratique des codes correspondants.

L'exploitation critique et raisonnée des données est également discutée.

Objectifs

Comprendre l'approche en Dynamique Moléculaire classique et savoir s'en servir; comprendre l'approche Monte Carlo et savoir s'en servir ; savoir implémenter ces approches pour des systèmes de particules en interaction, avec des conditions périodiques aux bords ; apprécier les enjeux de la production de nombres pseudo-aléatoires ; savoir interpréter des données de type physique statistique pour des observables simples statiques ou des propriétés structurelles issues des simulations, y compris l'appréciation des erreurs statistiques ; prendre conscience des difficultés d'équilibration, de corrélations, etc.; savoir mettre en place l'ensemble de ces méthodes à l'aide d'un langage compilé (C,C++ ou Fortran).



Pré-requis obligatoires

connaissance d'un langage de programmation ; un cours en Physique Statistique

Prérequis recommandés :

un langage de programmation compilé (C, C++ ou Fortran) en programmation impérative

Contrôle des connaissances

Contrôle Continu Intégral

Syllabus

Sensibilisation à l'approche atomistique et à la modélisation des interactions; Aperçu des méthodes de Dynamique Moléculaire et Monte Carlo; Fondements de la méthode de Dynamique Moléculaire; Algorithmes d'Intégration et critères pour les évaluer; Vérification d'une implémentation par la conservation de l'énergie; Gérer les conditions périodiques aux bord ; adaptation des potentiels de paire : troncature, décalage et corrections associées; Utilisation de conditions périodiques aux bords et convention de l'image périodique la plus proche; Observables thermodynamiques statiques simples (température, pression, potentiel chimique); Appréciation des incertitudes statistiques; Analyse de la structure en termes de la fonction de corrélation densité-densité $g(r)$ et du facteur de structure statique $S(q)$; Nombres pseudo-aléatoires sur ordinateur : générateurs, subtilités, distributions non-uniformes; Théorie appuyant la méthode Monte Carlo : chaînes de Markov et bilan détaillé; Algorithme de Metropolis; Ensembles thermodynamiques en Dynamique Moléculaire et en Monte Carlo : thermostats et barostats.

Mise en place en pratique des méthodes vues en cours, pour des modèles simples (Lennard Jones, sphères dures, modèles d'Ising, etc.) en les implémentant dans un langage compilé.

Infos pratiques

Contacts

Responsable pédagogique

Norbert Kern

✉ norbert.kern@umontpellier.fr

FdS master physique

✉ fds-master-physique@umontpellier.fr



Lieu(x)

> Montpellier - Triolet