Outils de modélisation moléculaire

Niveau d'étude	ECTS	Composante	Période de l'année
Bac +5	**3 crédits**	**Sciences Fondamentales et Appliquées**	**Semestre 9**

En bref

Langue(s) d'enseignement: Anglais
Méthodes d'enseignement: En présence
Organisation de l'enseignement: Formation initiale
Ouvert aux étudiants en échange: Oui

Présentation

Description

La modélisation (simulation numérique) est une approche de plus en plus utilisée dans tous les domaines scientifiques, y compris la science des matériaux, la chimie, la biologie et la physique. Son ascension, depuis les années 1980, va de pair avec l'augmentation constante de la puissance de calcul, ainsi qu'avec l'amélioration des algorithmes de simulation utilisés. Dans un modèle donné d'un système, la modélisation permet de mesurer des grandeurs physiques qui sont inaccessibles expérimentalement, soit en raison de faibles intensités de signaux, soit en raison de conditions extrêmes, telles que des températures et des pressions élevées. La modélisation peut maintenant être considérée comme faisant partie de l'ensemble standard des outils d'étude des matériaux minéraux.

Objectifs

L'objectif de cette unité d'enseignement est d'introduire les principales méthodes utilisées pour simuler la structure et la dynamique des minéraux (Monte Carlo, Dynamique moléculaire). Cette introduction est étayée par de nombreux exemples sur les matériaux argileux (environ la moitié du module est une approche pratique) où l'étudiant rencontre les bases de la programmation, la structure générale d'un code de simulation, et où il est montré comment exploiter les résultats de la simulation pour arriver à des grandeurs physiques significatives.

Informations non contractuelles.
Dernière mise à jour le 14 février 2022

Heures d'enseignement

Outils de modélisation moléculaire - TP	TP	20h
Outils de modélisation moléculaire - CM	CM	5h

Pré-requis obligatoires

Opérations mathématiques - y compris les bases de l'intégration et de la différenciation, les bases des probabilités, les bases de la thermodynamique (1ère et 2ème loi, fonctions d'état), les bases des structures atomiques et de la cristallographie

Programme détaillé

Après un rappel des principaux concepts de la thermodynamique statistique nécessaires à la compréhension des simulations au niveau atomique (ensembles thermodynamiques, moyennes d'ensemble, etc.), les principales méthodes de modélisation à l'échelle atomique sont présentées: Monte Carlo, Dynamique moléculaire, LAMMPS. Nous montrons plusieurs exemples récents de simulations sur des argiles, en mettant en évidence les grandeurs physiques qu'elles nous permettent de calculer. Nous terminons en montrant les multiples points de comparaison des données simulées avec les résultats expérimentaux, principalement par des techniques de diffusion (diffusion des rayons X et des neutrons), et mettons en évidence les informations supplémentaires que les simulations apportent dans la description des argiles.

Compétences visées

Dans le cadre des cours, l'étudiant apprendra les principaux concepts de la thermodynamique statistique et les principes des deux principales méthodes de modélisation moléculaire - Monte Carlo et Dynamique Moléculaire, incluant de nombreux exemples sur les matériaux argileux. Environ la moitié du module est un travail pratique, où l'étudiant rencontre les bases de la programmation, la structure générale d'un code de simulation, et où est montré comment exploiter les résultats de la simulation pour arriver à des grandeurs physiques significatives.

Infos pratiques

Lieu(x)

Poitiers-Campus

Informations non contractuelles.
Dernière mise à jour le 14 février 2022