

# Simulations atomistiques et interactions ions-matière

ECTS  
6 crédits

Composante  
Sciences Fondamentales et Appliquées

## Présentation

### Description

Simulation atomistique: Apprentissage des techniques de simulations atomistiques de types dynamique moléculaire, théorie de la Fonctionnelle de Densité et Monte Carlo.

Interaction ions-matière: Étude des mécanismes d'interaction des ions avec la matière. Les phénomènes physiques associés sont décrits en insistant sur les mécanismes de perte d'énergie et sur les modifications induites dans les solides, notamment les défauts produits. Il sera complété par une analyse de cas avec la démarche de calculs, la prise en main des logiciels de simulation (SRIM, SIMTRA) et l'analyse de données expérimentales.

### Objectifs

Simulation atomistique: Acquérir des connaissances en simulation numérique permettant la description de la matière de l'échelle atomique à l'échelle mésoscopique à l'aide de logiciels utilisés en laboratoire

Interaction ions-matière: Comprendre les mécanismes d'interaction des ions avec la matière et de mettre en application ces connaissances à des cas pratiques.

### Liste des enseignements

|                           | Nature | CM  | TD | TP | Crédits |
|---------------------------|--------|-----|----|----|---------|
| Simulation atomistique    | EC     | 20h |    |    |         |
| Interactions ions-matière | EC     | 12h |    | 6h |         |

UE = Unité d'enseignement

EC = Élément Constitutif