



## Introduction à la Dynamique Moléculaire

- Grâce au développement extraordinaire des moyens de calcul, les techniques de simulation de pointe réservées aux spécialistes il y a encore quelques années sont maintenant à la portée des chercheurs. Parmi ces techniques, la **Dynamique Moléculaire** est un outil extrêmement puissant permettant d'aider à la compréhension des phénomènes dans des domaines aussi variés que la science des matériaux, la chimie ou la mécanique.
- L'objectif de cette formation est d'offrir un aperçu des techniques de dynamique moléculaire, et surtout, d'apporter aux étudiants-chercheurs les bases nécessaires pour réaliser l'étude de problèmes simples en lien avec leurs domaines de recherche.
- La formation se déroulera sur 5 jours. Elle débutera par une brève présentation de la méthode et des outils de simulations utilisés. Très rapidement, les participants seront amenés à apprendre à utiliser un outil de simulation (LAMMPS) sous forme de TD et se lanceront dans le développement d'un projet de leur choix ou proposé (réalisation d'un essai de traction, mouvement d'une dislocation, changements de phases, polymères, *etc...*).
- Des chercheurs interviendront pour présenter leurs travaux de recherches en lien avec l'utilisation de la dynamique moléculaire.
- Cette formation s'adresse aux étudiants en master, doctorants. Il est nécessaire d'amener un ordinateur portable sur lequel vous disposez des droits administrateurs. Deux logiciels libres seront utilisés : LAMMPS (<http://lammps.sandia.gov>) pour la simulation et OVITO pour la visualisation (<http://www.ovito.org>).

**Dates : 18, 20 et 21 novembre 2013 (Cours, TD et début projets), 2 et 9 décembre 2013 (suivi des projets).** Journées complètes.

Lieu : Laboratoire MATEIS – INSA de Lyon, bâtiment Saint-Exupéry 3<sup>ième</sup> étage, 25 avenue Capelle, 69621 Villeurbanne Cedex

Nombre de place : 10 maximums

Intervenants :

Julien Morthomas (MdC) ([julien.morthomas@insa-lyon.fr](mailto:julien.morthomas@insa-lyon.fr)), Michel Perez (Pr.) ([michel.perez@insa-lyon.fr](mailto:michel.perez@insa-lyon.fr)) et Patrice Chantrenne (Pr.) ([patrice.chantrenne@insa-lyon.fr](mailto:patrice.chantrenne@insa-lyon.fr))

Personnes à contacter pour participer : Julien Morthomas ([julien.morthomas@insa-lyon.fr](mailto:julien.morthomas@insa-lyon.fr)) et en copie ([meriem.dahmani@insa-lyon.fr](mailto:meriem.dahmani@insa-lyon.fr))