

Initiation à la simulation moléculaire

Encadrants: Christophe Labbez (christophe.labbez@u-bourgogne.fr) & Jean-Marc Simon (jean-marc.simon@u-bourgogne.fr), Département Interfaces.

Les outils de simulation moléculaire sont aujourd'hui incontournables dans le monde de la recherche académique mais également dans les laboratoires de R&D des grands groupes industriels. En effet, au-delà des gains économiques qu'ils procurent, ils permettent dans bien des cas de comprendre et prévoir le comportement de systèmes complexes difficilement accessible autrement.

Le projet aura pour but d'initier le candidat aux deux principaux outils de simulation moléculaire classiques que sont le Monte Carlo et la Dynamique Moléculaire. Le candidat, pourra ensuite dans son stage mettre en œuvre les connaissances acquises parmi un des sujets qui lui sera proposé, allant de la cristallisation aux forces colloïdales, jusqu'à la stabilité des hydrates de gaz et la réactivité dans les ciments.

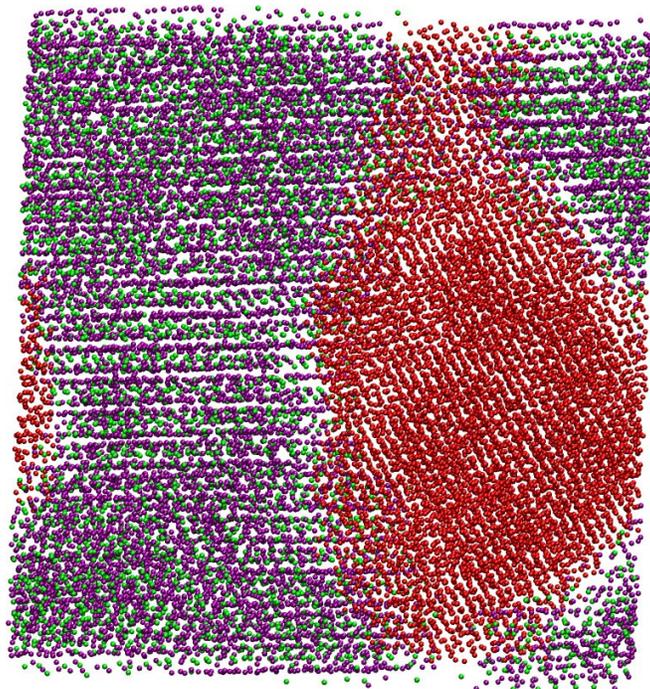


Illustration de la cristallisation d'une suspension colloïdale obtenue par simulation Monte Carlo