

Outils de simulation numérique pour la R&D en matériaux : d'hier à demain

UM -11

Atelier Scientifique

Domaine : Mathématiques, Informatique, Physique, Systèmes

Présentation :

Thèmes : Banque de données, calcul de structure cristalline, énergie des défauts, calcul de structure électronique et outils de simulation spectres ou de diffractogrammes, calcul d'interface, d'énergie de surface, DFT, de forme de Wulff, Materials Project, PyMatGen, ATOMS, ABTEM

Participation d'étudiants/doctorants de Montpellier

Dates et Horaires :

Mercredi 3 juin - 11h00 -12h30

Mercredi 3 juin - 14h -15h30

Mercredi 3 juin - 15h30 -17h00

Activité ouverte à la communauté universitaire montpelliéraine (sur inscription)

Porteur(s) de l'atelier :

Eric ANGLARET, Professeur, Polytech/L2C

Université de Montpellier

eric.anglaret@umontpellier.fr

Nadi BRAIDY, Professeur - Faculté Génie

Université de Sherbrooke