

# **Simulating and Modeling Material Properties**

**M. Landeiro Dos Reis**

## **Méthodologie (1 h)**

1. Introduction à la modélisation des matériaux
2. Introduction à la dynamique moléculaire appliquée aux matériaux (défauts, propriétés mécaniques, diffusion)
3. Introduction au Monte Carlo cinétique (diffusion)

## **Applications (1.5 h)**

1. Diffusion des défauts ponctuels dans un métal : de la MD au KMC
2. Nanoindentation