

Logiciels de chimie au service des matériaux (CT9)

Noël Jakse

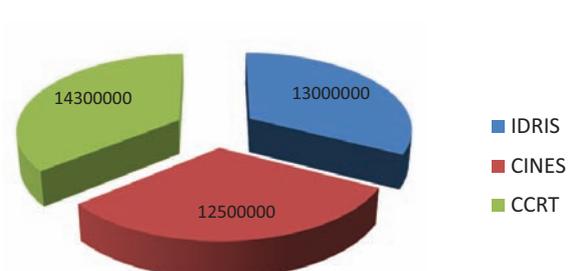
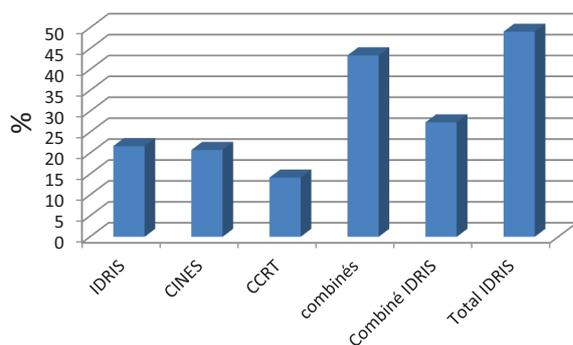
CT9 : PHYSIQUE, CHIMIE ET PROPRIETES DES MATERIAUX

Un peu plus d'une centaine de projets scientifiques

- typiquement 3 ou 4 permanents par projet
- 20 % de nouveaux projets par an
- volumes allant de 10 000 h à 4 000 000 heures /cpu

Utilisation des centre de GENCI

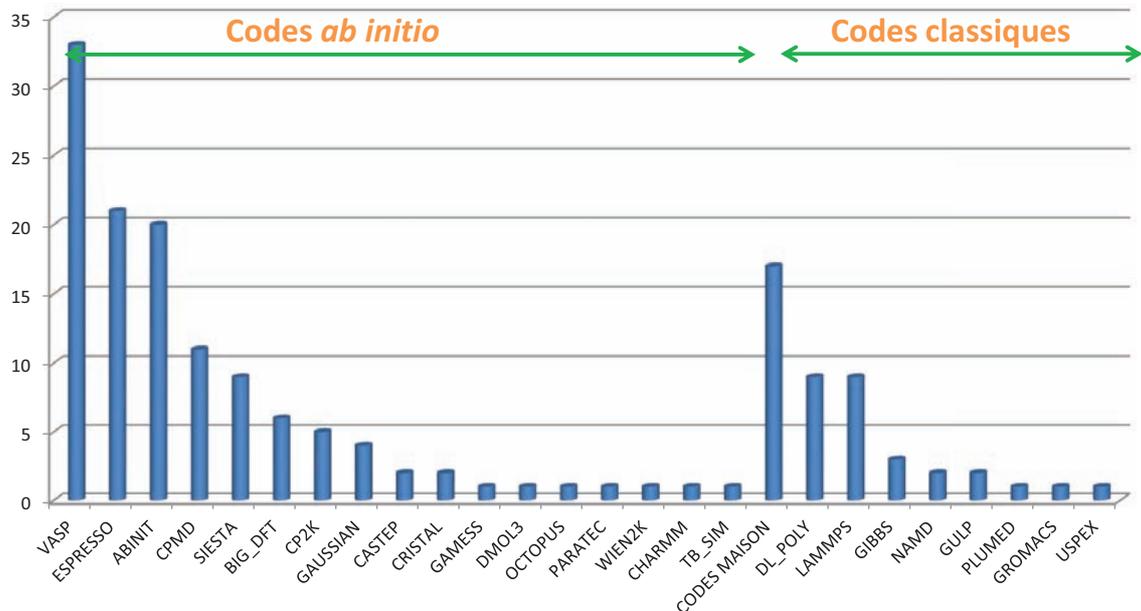
- 49 % des projets CT9 font appel à IDRIS
- IDRIS représente 1/3 des heures attribuées soit 13 millions



CT9 : PHYSIQUE, CHIMIE ET PROPRIETES DES MATERIAUX

Logiciels utilisés

- 70 % des projets utilisent des codes de simulation *ab initio*
- 50 % des projets utilisent une combinaison de codes
- 15 % des projets utilisent des codes « maison »



TRAQUER LES DEFAUTS DANS LES MATERIAUX (2012)

Bruneval et al., CEA service de recherche en métallurgie physique.

Domaine d'application : Matériaux pour l'énergie

Matériaux soumis à irradiation : création de défauts dans les matériaux

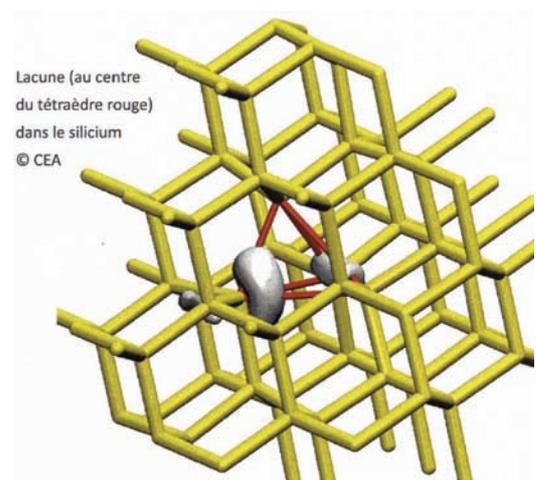
- Implication lourde sur les propriétés des matériaux
- nucléaire, aérospatiale

Connaissance du comportement des défauts

- création et diffusion des défauts
- renforcer la résistance des matériaux.

Codes *ab initio* : Quantum espresso, Abinit

- Minimisation d'énergie
- Calculs de structure électronique / 100 atomes
- < 256 cœurs



PHENOMENES DE SURFUSION PAR DYNAMIQUE MOLECULAIRE AB INITIO (2010)

Jakse, Le Bacq, Pasturel Institut polytechnique de Grenoble

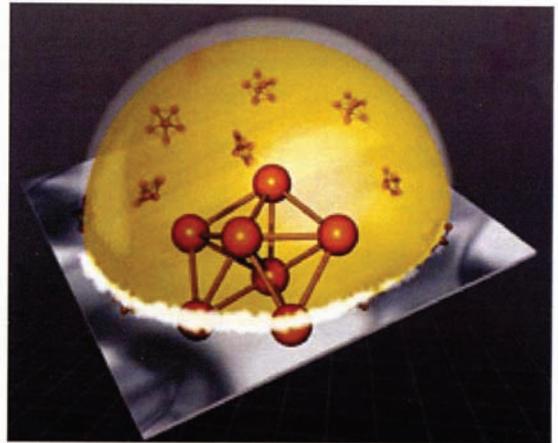
Domaine d'application : croissance de nanofils, métallurgie

- Croissance de nanofils : le liquide Au-Si joue le rôle de catalyseur
- Obtention de nouveaux matériaux à partir de la surfusion profonde.

Code ab initio : VASP

- dynamique 450 atomes sur 50 ps
- 96 cœurs / 400 000 h cpu

Gouttelettes d'Or-Silicium déposé sur un substrat de silicium



STOCKAGE DE L'ENERGIE : MODELISATION AB INITIO (2009)

Doublet, Fihol, Lemoigno, Institut Charles Gerhardt, Montpellier

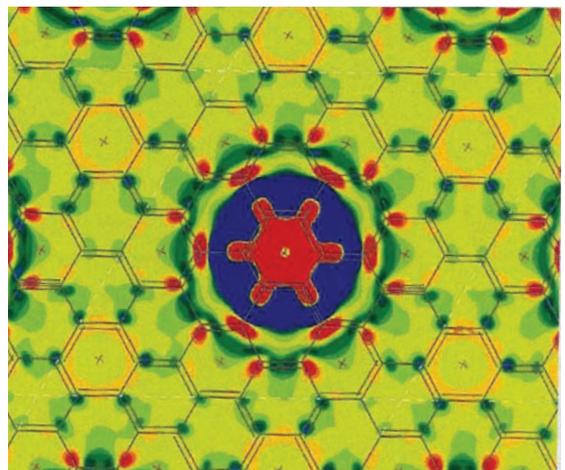
Domaine d'application : Stockage de l'énergie

- Batteries Li-ion
- Compréhension des phénomènes à l'origine des réactions électrochimiques
- Aspects cinétiques à l'insertion de Lithium

Code ab initio : VASP

- Minimisation d'énergie
- Calcul de structure électronique
- <256 cœurs / 100 000 h cpu

Carte de réorganisation de structure électronique De l'insertion d'un atome de Lithium dans une électrode de graphite



GUERIR LES AFFECTIONS GRAVES (2011)

Maurin et al. , Institut Charles Gerhardt, Montpellier

Domaine d'application : Médical et pharmaceutique

- Métal Organic Frameworks (MOF)
- Encapsulation et libération des principes actifs

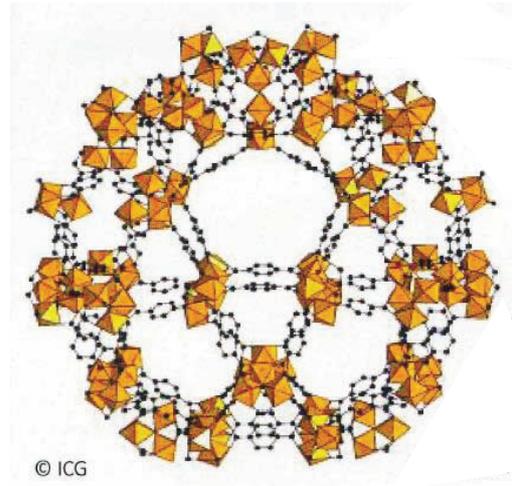
MOF à base carboxylate de fer MIL-53(Fe)
fonctionnalisé avec groupement amino
Interaction forte avec le sulfan (anti-tumorale)

Codes *ab initio* : VASP, CRISTAL09, GULP

Codes classiques : DL_POLY

Codes maison : Monte Carlo, Code QSAR

- Minimisation d'énergie : 300 atomes
- dynamique 10000 atomes sur 1 ns
- 256/1024 cœurs



CONCLUSION

- Les codes *ab initio* représentent 70 % de la demande
- Développements de codes *ab initio* pour architectures massivement parallèles
développement de nouveaux algorithmes
- Evolution vers une approche multi-échelle des matériaux
chaines de codes quantiques et classiques
- Nécessité de disposer de moyens informatiques de plus en plus importants

Merci de votre attention