

DU CÔTÉ DE LA CHIMIE

A L'IDRIS

Jean Marie TEULER

Étienne GONDET



Depuis le dernier numéro des lettres de l'IDRIS, le catalogue des applications Chimie disponibles à l'IDRIS s'est largement étoffé : des logiciels ont évolué et d'autres sont apparus. Cet article fait le point sur ces évolutions.

NOUVEAUX LOGICIELS DE CALCUL

◆ Dalton

Dalton est un logiciel de chimie quantique *ab initio* très sophistiqué et remarquable notamment par l'étendue et la diversité des propriétés moléculaires qu'il permet de calculer. Il permet par exemple d'étudier les états excités avec excitations de cœur (*core hole*), de déterminer des propriétés RMN, d'utiliser la méthode SOPPA (*Linear Second-Order Polarization Propagator Approach*), d'évaluer des fonctions de réponse jusqu'à l'ordre 3 etc.

Dalton, nommé ainsi en hommage au grand chimiste homonyme, est développé par des équipes universitaires norvégiennes et danoises. Dalton est disponible sur la grappe Pascal.

◆ Jaguar

Jaguar se présente comme l'un des logiciels les plus rapides de tous les logiciels de chimie quantique, d'où son nom (il était autrefois connu sous le nom PS-GVB). Il s'agit d'un logiciel commercial, fourni par la société Schrödinger, Inc. Jaguar utilise une approche très originale, combinant des méthodes pseudo-spectrales et des techniques de calcul de corrélation fortement locales.

Comme Jaguar est très rapide, il est possible de l'utiliser pour étudier des structures complexes comme des agrégats métalliques, des systèmes en solution, des phénomènes de catalyse etc. Jaguar est disponible sur la grappe Pascal.

◆ LEaP

LEaP est un module d'Amber destiné à remplacer la chaîne de programmes préparatoires d'Amber (d'ailleurs LEaP est un acronyme de ces programmes : Link, Edit and Prep).

Ce n'est pas une nouveauté à proprement parler car LEaP fait partie de la distribution d'Amber 5.0, en service à l'IDRIS depuis quelque temps déjà. Simplement, ce module n'avait pas été installé jusqu'ici. LEaP est maintenant disponible sur le serveur graphique Rhodes et la grappe Pascal.

NOUVEAUX LOGICIELS DE VISUALISATION

◆ Molden

Molden est un logiciel de visualisation moléculaire très simple et très complet.

Il peut s'utiliser à partir de tout écran X-Window sur des fichiers de données ou des fichiers de résultats de logiciels de calcul comme Adf, Gamess, Gaussian et Mopac (tous disponibles à l'IDRIS). Il permet de visualiser des géométries, des cartes de densité électronique, des orbitales moléculaires, des chemins de réaction, des modes normaux de vibration, ainsi que de déterminer des charges par la méthode ESP.

Il permet également de visualiser des protéines, de générer des animations, voire de servir de Molecular Builder (via la fonction Z-matrix Editor). On accède à toutes ces possibilités à travers une interface très simple.

Bref Molden est le véritable *couteau suisse* de la visualisation moléculaire.

Molden est disponible sur le serveur graphique Rhodes et sur la grappe Pascal.

◆ Molekel

Molekel est un logiciel de visualisation moléculaire tridimensionnel très sophistiqué, permettant de tirer tout le parti possible des écrans graphiques GL.

Il a été développé à l'Université de Genève et à l'École Polytechnique de Zurich.

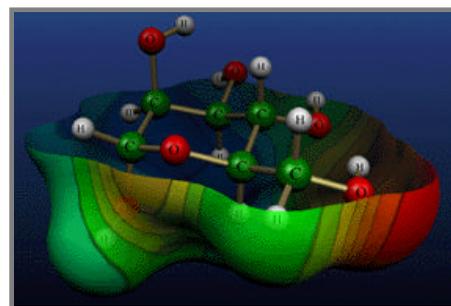
Tout en offrant la plupart des fonctions que l'on attend d'un logiciel de visualisation, Molekel offre des fonctions exclusives comme la possibilité de texturer une surface en fonction d'une grandeur chimique associée, comme par exemple le potentiel électrostatique.

Grâce à des effets de transparence, Molekel permet de visualiser les intersections d'une surface 3D avec un plan de coupe.

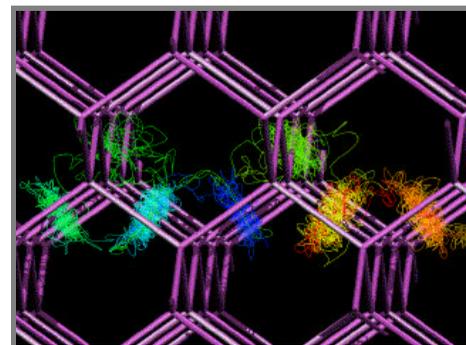
Il permet également de réaliser des animations et de visualiser des trajectoires de dynamique moléculaire. Il s'utilise sur des fichiers de données ou de résultats de toute une série de logiciels comme Gaussian, Gamess, Adf, DeMon, Charmm etc.

Pour donner une première idée de la qualité graphique offerte par Molekel, on pourra observer les illustrations qui accompagnent cet article car elles ont toutes été produites avec ce logiciel.

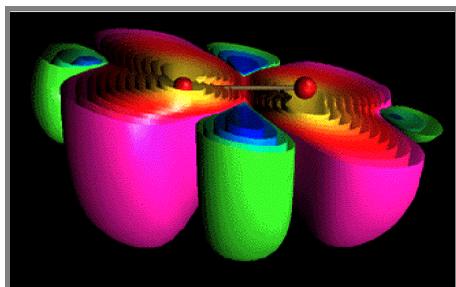
Molekel est disponible sur Rhodes uniquement, et nécessite de disposer d'un écran GL.



Ball-and-stick model of a mannose molecule (with atom-type labels) with its molecular electrostatic potential, color-coded (using discrete colors and contour lines) on the semi transparent molecular surface (which is clipped by a clipping plane). The entire picture is depth-cued.



The trajectory of a hydrogen atom inside a regular silicon crystal (depicted as stick model using Orthographic projection). The trajectory is colored as a function of time: it starts in red, then orange, yellow, green, cyan and finally blue.



The spin density distribution of triplet oxygen. The yellow, red and magenta surfaces represent isovalue surfaces of positive spin, and the blue and green surfaces are isospin surfaces around regions of negative spin.

NOUVELLES VERSIONS DE LOGICIELS

◆ **Adf 1999.02**

Cette version fait suite à la version 2.3 déjà disponible à l'IDRIS. Elle offre de nouvelles fonctionnalités comme la méthode relativiste Zora, les propriétés de réponse (fondées sur l'emploi de la méthode Time Dependant DFT), les propriétés RMN, les effets de solvant etc. Elle est disponible sur la grappe Pascal et sera disponible sur la T3E (Aleph) dès que ses auteurs en auront finalisé le portage.

◆ **Crystal 98**

Cette version fait suite à la version 1995, déjà disponible à l'IDRIS. De nouvelles techniques ont été introduites comme les Symmetry adapted Bloch functions, (qui permettent de traiter des systèmes symétriques de très grande taille), ou bien d'autres qui permettent plus efficacement les systèmes métalliques. De nouvelles propriétés peuvent être calculées comme par exemple les courants STM (approximation de Tersoff-Haman). Crystal 98 est disponible sur la grappe Pascal et sur la T3E (Aleph).

◆ **Gaussian 98, Révision A7**

Cette version fait suite à la version 94, déjà disponible à l'IDRIS. Afin de pouvoir traiter efficacement les très grosses molécules, cette nouvelle version incorpore de nouvelles méthodes comme la méthode FMM (Fast Multipole Method) ou la méthode ONIOM de Morokuma qui permet de subdiviser un système en sous-systèmes traités à des niveaux de précision différents (ab initio, semi-empirique, mécanique moléculaire), ou encore la méthode ZINDO qui permet d'étudier les états excités de grosses molécules. L'étude des systèmes en solution a aussi été grandement améliorée, et de nouvelles méthodes ont été introduites comme la méthode CBS- 4M et la méthode G3. Gaussian 98 est disponible sur la grappe Pascal et sur les machines vectorielles C90 (Atlas et Axis) et VPP300 (Shine).

◆ **Molcas 4.1**

Cette version apporte notamment un nouveau programme de calcul CCSD(T), et permet de localiser les états de transition. Un nouveau manuel de type didacticiel permet de découvrir simplement toutes les possibilités de Molcas. Molcas 4.1 est disponible sur la grappe Pascal.

◆ **Molpro 98.1**

Il s'agit essentiellement d'une version de consolidation, préparant l'évolution future de Molpro. Celle-ci s'annonce très intéressante, avec toute une panoplie de calculs directs et d'algorithmes très parallèles. En attendant, la version 98.1 apporte les gradients d'énergie analytiques pour les fonctions d'onde MP2 et DFT, ainsi que les calculs de fréquences fondés sur les différences finies de gradients analytiques. Molpro 98.1 est disponible sur la grappe Pascal.

LES NOTES TECHNIQUES DE L'IDRIS :

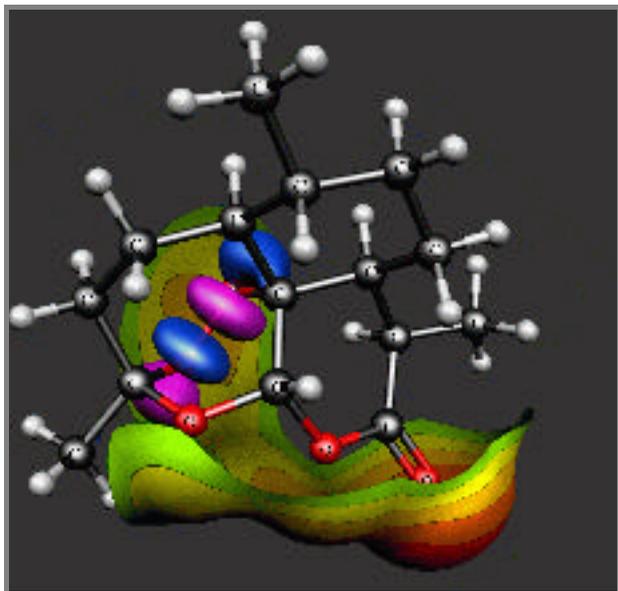
Pour chaque logiciel cité ici, une note technique décrivant son utilisation est disponible sur le serveur Web de l'IDRIS.

On trouvera la liste des notes techniques de chimie à la page

http://www.idris.fr/data/Notes_tech/list_NT_CHIMIE.html

LES NOUVEAUX SERVEURS DE CALCUL DE L'IDRIS

Comme cela est dit dans ce numéro de la Lettre de l'IDRIS, l'IDRIS est dans une phase de renouvellement de ses équipements vectoriels et scalaires. Nous ne doutons pas que les logiciels de chimie gagneront encore en efficacité sur ces nouveaux matériels.



A ball-and-stick representation of artemisin with its lowest unoccupied orbital (semi transparent blue and magenta surfaces) and the most negative regions of the molecular electrostatic potential on the molecular surface (using discrete colors and contour lines on the curved surface, which is trimmed according to the value of the potential).

« Les images, qui illustrent cet article sont extraites de la page Web officielle de Molekel (<http://igc.ethz.ch/molekel/>) et sont reproduites ici avec l'aimable permission de Stefan Portmann qui coordonne le développement de Molekel. »