

## Les journées de simulation numérique 2005

Paris, 2-3 juin 2005

Organisées par une équipe de sept personnes, dont quatre de l'Institut des Nanosciences de Paris (INSP), les 11<sup>e</sup>s journées de simulation numérique se sont déroulées à l'Université Pierre et Marie Curie (Paris 6). Elles étaient consacrées cette année à la matière condensée et à la confrontation des simulations et des résultats d'expériences, lorsque ces expériences sont réalisables.

### Résumé des communications orales

**Étienne Balan** (IMPMC, Paris) : combinaison du calcul *ab initio* du tenseur diélectrique du minéral avec une modélisation macroscopique de l'absorption du rayonnement infrarouge, afin d'analyser l'organisation et la composition chimique des minéraux hydratés et finement divisés rencontrés à la surface de la Terre. Les spectres d'argiles du groupe de la kaolinite  $\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$  et du groupe des serpentines  $\text{Mg}_3\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_2$  ont été ainsi déterminés.

**Claude Chachat** (Orsay) : présentation d'un vaste panorama des simulations de spectres RMN et RPE (spectres RPE de radicaux, biradicaux, ions paramagnétiques de spin 1/2 en matrice rigide), et calcul en phase liquide des largeurs de raie en fonction des coefficients de diffusion.

**Jean-Pierre Crocombette** (SRMP CEA, Saclay) : simulation par dynamique moléculaire du passage d'un état ordonné cristallin à un état désordonné dans le zirconate de lanthane, de structure pyrochlore, sous l'effet d'une irradiation (figure 1).

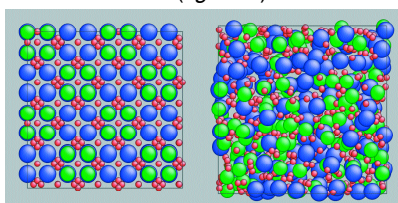


Figure 1 - Sous l'effet d'une accumulation de défauts ponctuels (paires de Frenkel), le zirconate de lanthane  $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  passe d'une structure atomique cristalline (à gauche) à une structure amorphe (à droite) (atomes de Zr en bleu, La en vert et O en rouge).

**Anthony Dyan** (LPCS, Paris) : calcul de la structure électronique de molécules d'intérêt biologique par des méthodes semi-empiriques. Traditionnellement, le temps de calcul nécessaire à la diagonalisation de la matrice de Fock et à la reconstruction de la matrice-densité varie comme le cube de la taille du système :  $\text{O}(\text{N}^3)$ . Le

caractère creux des matrices rencontrées et l'algorithme « suite de problèmes quadratique » (SPQ) permettent de ramener le temps de calcul à  $\text{O}(\text{N})$  et d'aborder des molécules de grande taille.

**Denis Grebenkov** (Paris-Sud, Orsay) : modélisation de la « diffusion restreinte » de l'oxygène dans un « labyrinthe tridimensionnel » schématisant l'arbre bronchique.

**Anne Hemeryck** (LAAS, Orsay) : présentation des calculs *ab initio* de la réaction d'une molécule d'oxygène sur une surface de silicium. Les résultats contribuent à la modélisation de la croissance de l'oxyde de silicium à partir de silicium pur et d'oxygène.

**Laurent Joly** (PMCN, Lyon) : étude de la distribution des charges électriques avec formation de double couche dans une solution aqueuse au voisinage de la surface d'un solide. À l'échelle nanométrique, la description des effets électrocinétiques au moyen des lois de l'hydrodynamique macroscopique est insuffisante et doit être complétée par des simulations de dynamique moléculaire.

**Cindy Lee Rountree** (DRECAM CEA, Saclay) : modélisation de la morphologie et de la propagation d'une fissure dans la silice amorphe à l'aide de simulations de dynamique moléculaire impliquant des dizaines de millions d'atomes.

**Adrien Lerbret** (LDSMM, Lille) : étude par dynamique moléculaire, à plusieurs températures et concentrations, des solutions aqueuses de tréhalose, de sucrose et de maltose, pour contribuer à la compréhension des mécanismes de « bioprotection » par des disaccharides.

**Franck Moulin** (LPM, Besançon) : introduction d'une méthode auto-cohérente de calcul du dipôle induit sur un nanotube de carbone par les molécules d'eau environnantes pour simuler l'interaction de nanotubes de carbone avec des molécules d'eau par dynamique moléculaire. Cet effet est significatif pour les molécules d'eau adsorbées sur son enveloppe ou localisées à l'intérieur du tube.

**Gérard Parlant** (LSDSMS, Montpellier) : mise en œuvre de la méthode des trajectoires quantiques de Robert Wyatt, basée sur la formulation hydrodynamique de Bohm de la mécanique quantique. Cette approche a permis de mettre au point une méthode de dynamique mixte combinant des trajectoires classiques et des trajectoires quantiques.

**Virginie Quequet** (LSI, Palaiseau) : calcul des énergies totales du titane et du dioxyde de titane dans leurs différentes formes cristallines à l'aide de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). En corrigeant les pseudo-potentels de l'auto-interaction électronique, la stabilité relative des deux phases anatase et rutile de  $\text{TiO}_2$  est conforme à l'expérience.

**Vincent Reboud** (INSP, Paris) : résolution des équations de Maxwell dans un matériau appelé cristal photonique, doté d'une double périodicité spatiale car constitué de silicium percé d'un réseau de trous remplis de silicium dopé à l'erbium.

**Thomas Roussel** (CRMN, Marseille) : recherche sur le stockage de l'hydrogène. En utilisant la méthode de Monte-Carlo dans l'ensemble grand canonique, il simule l'incorporation du carbone sous forme vapeur dans les microporosités de zéolithes. Diverses structures de carbone sont obtenues en fonction de la taille et de la topologie des pores de la zéolithe.

**Jelena Sjakste** (LSI, Palaiseau) : étude par une méthode quantique *ab initio* du couplage électron-phonon et de la diffusion inter-vallées dans l'arséniure de gallium ou le phosphure de gallium (GaAs, GaP) (les semi-conducteurs présentant des minima locaux appelés vallées de la bande de conduction des électrons).

**Hans-Christian Weissker** (LSI, Palaiseau) : mise en œuvre de la DFT dépendante du temps pour simuler la fonction diélectrique et le spectre de diffusion inélastique des rayons X par le silicium.

La simulation numérique rend de grands services dans des disciplines scientifiques très variées, de l'astrophysique à la physique des particules élémentaires, en passant par la géologie, la mécanique des fluides, la physique des plasmas et la chimie. Dans chacun de ces domaines, les praticiens de la simulation numérique ont probablement d'autres occasions de rencontrer des spécialistes dont les intérêts scientifiques sont proches des leurs. En d'autres termes, le champ d'application de la simulation numérique est devenu immense et il est naturel de le fractionner en champs plus petits. Le risque est évidemment que la « fertilisation croisée » entre les disciplines progresse plus lentement.

• <http://www.ccr.jussieu.fr/jsnum/>

Edgar Soulié