

LA SIMULATION NUMÉRIQUE POUR L'ÉTUDE DE LA MATIÈRE

La modélisation numérique au service de l'étude des matériaux

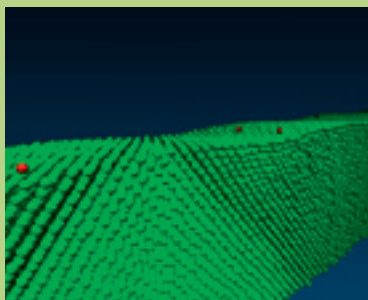


>>> Lionel CALMELS, Professeur UPS, chercheur au Centre d'Élaboration de Matériaux et d'Études Structurales (CEMES, unité propre du CNRS associée à l'UPS)

Il est possible de synthétiser des matériaux originaux de très grande qualité, dont la structure atomique et chimique peut être contrôlée avec une précision remarquable. Certains de ces matériaux n'existent pas à l'état naturel et sont créés dans les laboratoires de recherche en structurant la matière à l'échelle nanométrique. Ces matériaux possèdent des propriétés physiques inattendues. Ils sont l'objet de nombreuses recherches fondamentales dont le but est de comprendre l'origine de leurs propriétés. Ils donnent lieu à des applications dans des domaines aussi variés que les bionanotechnologies, la microélectronique, les médias et mémoires magnétiques, les matériaux de structure...

Supercalculateur

Mais, pour comprendre l'origine microscopique des propriétés physiques de ces matériaux et pour interpréter les expériences dont ils sont l'objet, il est indispensable de faire des calculs et des simulations numériques. Ces simulations numériques sont complexes, car il s'agit de décrire le comportement d'un très grand nombre d'électrons et de noyaux en interaction. Les équations qui décrivent le comportement physique de ces matériaux ne peuvent être résolues que grâce à des supercalculateurs, tels que celui que le groupement scientifique CALMIP (Calculs en Midi-Pyrénées) met à disposition des chercheurs et enseignant-chercheurs. Les principaux laboratoires toulousains dans lesquels les propriétés physiques des matériaux sont étudiées par simulation numérique sont le CEMES¹, le CIRIMAT², le LAAS³, et les laboratoires rattachés à l'IRSAMC⁴. Plus d'une trentaine de projets issus de ces laboratoires sont soumis chaque année à CALMIP. En 2011, 5 000 000 d'heures ont été demandées, soit 22% de la demande globale. Les codes de calcul utilisés par cette communauté sont bien adaptés aux architectures massivement parallèles et tournent en production sur le calculateur de CALMIP, appelé Hyperion.



>>> Auto-organisation grâce à une onde acoustique stationnaire (modélisation en dynamique moléculaire) : Les atomes diffusant sur un substrat soumis à une onde acoustique stationnaire de surface se positionnent préférentiellement dans le voisinage des ventres de déplacement de l'onde.
(Nicolas COMBES, CEMES)

- 1 Centre d'élaboration des matériaux et d'études structurales
- 2 Centre Interuniversitaire de Recherche Ingénierie Matériaux
- 3 Laboratoire d'analyse et d'architecture des systèmes
- 4 Institut de Recherche sur les Systèmes Atomiques et Moléculaires Complexes

Contact : calmels@cemes.fr

CALMIP et le supercalculateur Hyperion:

Le groupement scientifique CALMIP, grâce au soutien de l'Université Paul Sabatier, en collaboration avec le PRES Université de Toulouse, met à la disposition de la communauté scientifique régionale une plateforme de calcul de niveau européen. Le supercalculateur Hyperion (2912 cores, 33 Téraflopp) a été acquis en 2009 sur des fonds du CPER (contrat de projet Etat-région), et est hébergé et géré par les personnels de la DTSI (direction des technologies et des systèmes d'information) de l'UPS. L'interaction entre les chercheurs et l'équipe technique de CALMIP permet d'optimiser le temps de restitution de chaque calcul. A titre d'exemple, le temps de calcul de la structure électronique au voisinage de défauts de la magnétite a ainsi été réduit de 5 h 45 min à 17 minutes; on peut aussi citer les calculs menés sur un nanocube de Fe: l'utilisation de 256 processeurs a permis de réaliser un cycle de calcul en 30 secondes (plusieurs milliers de cycles sont nécessaires). La collaboration entre l'équipe technique CALMIP et les utilisateurs néophytes, non numériques et non informaticiens, permet de paralléliser les codes qu'ils ont développés (par exemple accélération d'un code destiné à l'étude des propriétés électromagnétiques de nano-objets, et monopolisant plus de 200 Go de mémoire partagée). Pour continuer à répondre à ces besoins et pour décupler ses ambitions scientifiques, CALMIP, dans le cadre du projet EQUIP@MESO (EQUIPEX) va accroître ses capacités de calcul: plusieurs centaines de processeurs et plusieurs téra-octets en mémoire partagée supplémentaires, seront mis en production au début de l'année 2012.

Contacts: Nicolas Renon, ingénieur de recherche de l'Université Paul Sabatier, responsable du calcul scientifique CALMIP (nicolas.renon@univ-tlse3.fr) et Pierrette Barbaresco, ingénieure de recherche, responsable du système CALMIP (pierrette.barbaresco@univ-tlse3.fr)



>>> Damien CONNÉTABLE, chargé de recherche CNRS, membre de l'équipe MEMO au Centre Interuniversitaire de Recherche et d'Ingénierie des Matériaux (Institut Carnot CIRIMAT, unité mixte UPS/CNRS/INP)

Simulations à l'échelle atomique en métallurgie

En métallurgie, certains mécanismes sont difficiles à tester expérimentalement. Depuis une vingtaine d'années, la métallurgie a bénéficié de façon importante des simulations numériques à différentes échelles. Les recherches menées au CIRIMAT sont emblématiques des progrès récents dans ce domaine.

Calcul et prédiction des diagrammes de phase

On peut aujourd'hui décrire des diagrammes de phases de systèmes complexes variés : des unaires (systèmes avec une seule espèce atomique) comme des systèmes multi-constitués (ternaires, quaternaires...). Les simulations ab initio, fondées sur les principes de la mécanique quantique sont utilisées comme générateurs de données (énergies de formation de phases) qui sont ensuite injectées dans un formalisme de thermodynamique d'équilibre. Les chercheurs sont ainsi amenés à optimiser de nombreuses structures (stables et méta-stables) qui peuvent entrer en jeu dans les équilibres entre phases. Les énergies obtenues sont ensuite utilisées en même temps que les données expérimentales pour optimiser des bases de données thermodynamiques destinées à la simulation des diagrammes de phase (en composition et en température). Ces bases de données peuvent être ensuite couplées à des bases de données de coefficient de diffusion (implémentées dans le logiciel DICTRA par exemple) pour réaliser des calculs de transformations de phases.

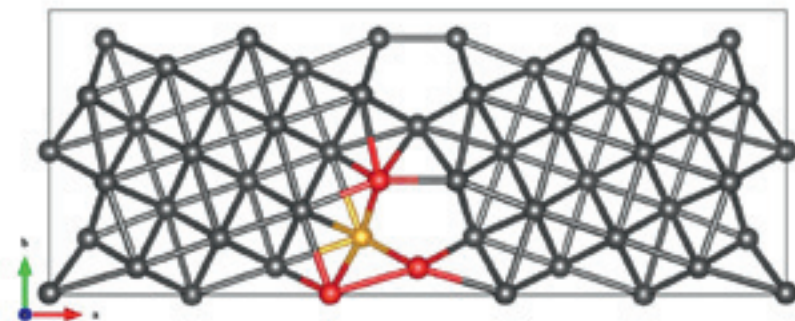
Migration des défauts

Une autre préoccupation des métallurgistes est la compréhension des processus de migration des

défauts (tels que les lacunes, les espèces en solution ou les défauts étendus...). Ces informations sont d'une grande importance dans la compréhension des mécanismes de vieillissement des structures. Les thèmes de recherche sont liées à des études expérimentales portant sur la compréhension des mécanismes de dégradation ou le vieillissement prématuré (corrosion sous contrainte, fragilisation par l'hydrogène...). Le nickel est l'un des éléments de base utilisé dans de nombreuses applications industrielles (aéronautique, nucléaire...) et est, de fait, très largement étudié au sein de notre équipe. Les lacunes du réseau entrent en jeu dans de nombreux mécanismes comme la corrosion, la diffusion, la formation de cavités, etc. À titre d'exemple, au Cirimat, les chercheurs ont calculé le processus de formation et de migration des lacunes et noté que les résultats obtenus (énergie de formation de 1,41 eV, et de migration de 1,05 eV) sont en très bon accord avec les données expérimentales (1,46-1,72 eV et 0,97-1,04 eV, respectivement).

Diffusion

Le Cirimat s'intéresse également aux interfaces et tout particulièrement à ce que l'on appelle les joints de grains. Ce sont des lieux privilégiés de ségrégation, de fissuration, ou encore des zones où la diffusion peut être rapide. Ces systèmes sont utilisés pour étudier la ségrégation des espèces en solution. Comprendre ce qui se passe au niveau de ces interfaces est d'une grande importance. Pour des atomes de niobium en solution dans le nickel, par exemple, on constate que l'énergie de ségrégation de cet élément est plus faible que son énergie d'insertion au sein du matériau massif. Ces résultats suggèrent que les atomes de niobium peuvent facilement se ségréger aux interfaces, risquant de modifier le comportement mécanique de celles-ci.



>>> Joint de grain de nickel $\Sigma 5$ (012). En rouge et jaune les différents sites étudiés pour ségréger des atomes de niobium.

Contact : damien.connetable@ensiacet.fr

Simuler le comportement des électrons pour la spintronique

La prometteuse électronique de spin a donné lieu aux premières applications industrielles. Mais le développement de composés électroniques aux propriétés nouvelles nécessite des simulations de haut vol.



L'électronique de spin, encore appelée « spintronique », est un domaine très récent de la physique. Les principaux composants de la spintronique que sont les vannes de spin et les jonctions tunnel magnétiques sont constitués par des couches minces métalliques magnétiques (les électrodes) séparées par une couche non magnétique d'épaisseur nanométrique. La résistance électrique de ces multicouches dépend de leur configuration magnétique: elle est plus faible si les aimantations des électrodes sont parallèles que si elles sont antiparallèles. Cet effet magnétorésistif, dont la mise en évidence a valu le prix Nobel de physique à Albert Fert et Peter Grunberg en 2007, permet d'écrire et de lire une information sous la forme d'un bit magnétique. Cette découverte initiale a donné lieu à de nombreuses recherches fondamentales et appliquées basées sur l'exploitation d'un courant électrique polarisé en spin. Les propriétés de magnétorésistance des vannes de spin et des jonctions tunnel sont déjà exploitées dans l'industrie des mémoires et des média magnétiques, qu'il s'agisse des têtes de lecture de disques durs ou des mémoires magnétiques MRAM (Magnetic Random Access Memories) des ordinateurs les plus récents.

Etudes fondamentales

Les phénomènes physiques qui régissent les propriétés électroniques et magnétiques des matériaux pour la spintronique sont l'objet de nombreuses études fondamentales. Pour comprendre le comportement des électrons dans ces multicouches, il est indispensable de faire appel à la physique quantique: c'est dans ce cadre que doivent s'inscrire les simulations numériques. En général, ces simulations reposent sur la « théorie de la fonctionnelle de la densité » (souvent désignée par son acronyme anglais DFT), qui permet de calculer la densité électronique et l'énergie de l'état fondamental du cristal magnétique. Les équations qui sont à la base de cette théorie ont été établies par Pierre Hohenberg, Walter Kohn et Lu Sham dans les années 1960. Ces équations sont à l'origine de la plupart des codes de calcul de la structure électronique utilisés pour étudier les matériaux cristallins. Leur résolution donne accès à l'énergie totale du cristal magnétique, à la densité d'états, ainsi qu'au moment magnétique des différents atomes.

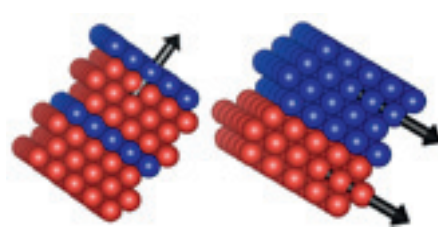
Courant tunnel

Les matériaux pour la spintronique sont étudiés dans le groupe « Nanomatériaux » du CEMES depuis de nombreuses années. Les calculs et les simulations qu'on y réalise ont permis de comprendre la nature des états électroniques qui contribuent au courant tunnel dans les jonctions tunnel magnétiques dont les électrodes sont constituées d'alliages à base de fer, de vanadium ou de cobalt (le comportement physique de ces jonctions dépend de la composition de ces alliages), ou de magnétite Fe_3O_4 . Des effets magnétorésistifs importants devraient être obtenus grâce à la magnétite qui est un matériau demi-métallique, c'est-à-dire conducteur pour les électrons de spin minoritaire et isolant pour les électrons de spin majoritaire.

Matériaux nanostructurés

Plus récemment, des recherches sur la manipulation de l'anisotropie magnétique des multicouches ont été menées dans le but d'obtenir des matériaux nanostructurés dont l'aimantation est perpendiculaire au plan des couches minces. Les multicouches qui présentent cette configuration magnétique sont très intéressantes: elles permettent de concevoir des médias magnétiques de plus grande densité, et leur aimantation peut être retournée en utilisant un courant électrique polarisé en spin de relativement faible intensité. L'anisotropie magnétique perpendiculaire est liée à la présence des interfaces entre couches magnétiques. Dans les super-réseaux Ni/Co: la direction de l'aimantation de ces systèmes dépend de l'épaisseur des couches de cobalt et de nickel successives (voir figure). Autre sujet d'intérêt: la modification de la valeur et de la direction du moment magnétique des atomes au voisinage des interfaces d'oxydes magnétiques. Les simulations numériques se font sur le supercalculateur Hyperion du groupement CALMIP de Toulouse.

>>> Rémi ARRAS, chargé de recherche CNRS; Lionel CALMELS, professeur UPS; et Florian GIMBERT, doctorant, chercheurs au Centre d'élaboration de matériaux et d'études structurales (CEMES, unité propre du CNRS associée à l'UPS)



Configuration magnétique de super-réseaux Co/Ni(111): l'aimantation est soit perpendiculaire aux interfaces si les couches de cobalt contiennent un plan atomique unique, soit parallèle aux interfaces si les couches de cobalt sont constituées de 4 plans atomiques.

Contact : calmels@cemes.fr



>>> Iann GERBER, maître de conférences au département de physique de l'INSA, chercheur au sein de l'équipe « modélisation physique & chimie des nano-objets (LPCNO, unité mixte INSA/UPS/CNRS)

Expliquer le comportement des nano-structures carbonées par le calcul

Le graphène, ainsi que les nanotubes, sont probablement à l'heure actuelle les plus intrigants des nano-matériaux, notamment du fait de leur formidable potentiel applicatif.

Pourtant, leur succès était loin d'être écrit. Prenons le graphène. Si ses propriétés physiques si singulières ont été prédites théoriquement depuis plus de 60 ans, son existence même a été un intense sujet de débat. Il aura fallu attendre les 10 dernières années pour enfin être capable d'isoler ces feuillets uniques de carbone organisé en nid d'abeille. Le prix Nobel de Physique 2010 a notamment récompensé des travaux pionniers dans ce sens. Aujourd'hui, le graphène est devenu le matériau de base de la prochaine génération de nano-électronique, grâce à son caractère purement 2D, forçant les électrons à se comporter comme des particules relativistes sans être accélérés à la vitesse de la lumière.

Simulation numérique

Quant aux nanotubes, ils n'ont été découverts qu'au début des années 1990. Imaginez le feuillet de graphène se refermant sur lui-même, en se courbant. Ils sont devenus un des autres emblèmes de la recherche en nanosciences du carbone. Les études théoriques et expérimentales qui se sont accumulées en totale synergie, combinées au fort développement dans les vingt dernières années de la simulation numérique de structures électroniques, ont permis de révéler de très intéressantes propriétés mécaniques, thermiques, électroniques mais aussi chimiques

Dans ce contexte de recherche très excitant, l'apport des calculs de structures électroniques basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité s'avère des plus précieux. Du fait de la configuration 1D ou 2D de ces systèmes il est permis de mener des calculs routiniers sur des modèles de quelques centaines d'atomes, en utilisant des ressources informatiques massivement parallèles.

Structure électronique

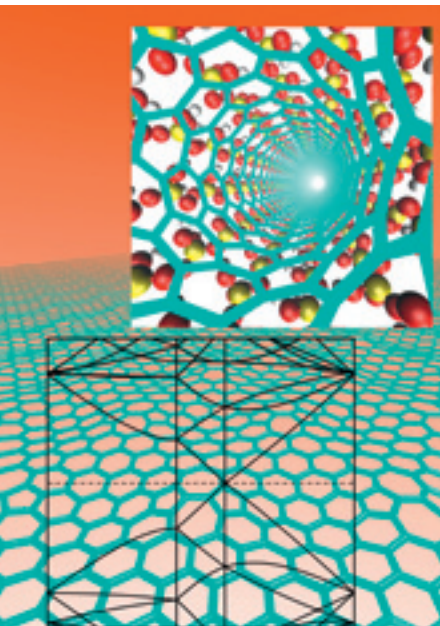
L'équipe du LPCNO s'est fixé pour objectif de mieux comprendre la chimie de surface de ces systèmes à l'aide du calcul théorique de leur structure électronique.

Et ceci pour aider nos partenaires expérimentateurs (l'équipe du Pr. Serp LCC-ENSIACET, B. Lassagne LPCNO, P. Puech CEMES). Plus particulièrement l'étude de la stabilité de défauts, de la fonctionnalisation des parois, de l'interaction métal-support nano-carboné sont de toute première importance. En effet lorsqu'il s'agit de synthétiser de nouveaux nano-catalyseurs à base de nanotubes décorés par des nanoparticules métalliques (Ru/Pt), de modéliser le dépôt d'une nanoparticule magnétique unique sur un nano-résonateur, ou même d'étudier les propriétés catalytiques d'agrégats de taille subnanométrique, il devient fondamental de décrire l'interaction entre le métal sous toutes ces formes (atomique, agrégat, nanocluster, surface) et le réseau graphitique.

Il est connu depuis longtemps que les super-acides du type H_2SO_4 ont un pouvoir p-dopant très important sur les tubes, dans un processus totalement réversible. Des calculs de structure de bandes nous ont ainsi permis d'élucider l'origine de ce dopage, observé expérimentalement par spectroscopie Raman, par une fonctionnalisation non-covalente opérant un transfert de charge entre l'acide et le nanotube de carbone.

Acide nitrique

Enfin, récemment, une étude combinée expérimentale/théorique nous a permis de proposer un mécanisme réactionnel concernant une étape essentielle dans le processus de fonctionnalisation des parois des nanotubes: le prétraitement à l'acide nitrique. Cette étape qui détruit d'abord les résidus de carbone amorphe, puis oxyde les surfaces en amenant majoritairement la formation de groupements carboxyliques et peut même mener jusqu'à la destruction complète des tubes a pu être expliquée par une réactivité très forte des défauts structuraux.



>>> Haut : au centre d'un nanotube de carbone en interaction avec une phase nématique de super-acide sulfurique. Bas : structure de bande du graphène immaculée.

Contact : igerber@insa-toulouse.fr

Décrire le mystère de la supraconductivité à haute température

Pourquoi certains matériaux deviennent-ils supraconducteurs lorsqu'ils sont refroidis à -150°C et non à des températures proches du zéro absolu ? Les simulations effectuées au Laboratoire de physique théorique démontrent qu'ils sont le siège de nouveaux états quantiques.

À la fin du XIX^e siècle, les travaux de Paul Drude ont permis d'expliquer le transport du courant électrique dans un métal traditionnel (comme l'aluminium par exemple) par le comportement individuel de chaque électron. Cependant, entre les expériences menées à Leiden en 1911 par Kamerlingh Onnes et la théorie développée par Bardeen, Cooper et Schrieffer en 1957, la physique des métaux connaît une première révolution. On comprend alors qu'en refroidissant des métaux à une température proche du zéro absolu ($-273,15^{\circ}\text{C}$), la conductivité usuelle du courant est remplacée par de la « supra »-conductivité, c'est à dire une conduction parfaite du courant électrique sans aucune résistance. Ce phénomène, quelque peu magique, s'explique alors très bien grâce à une description du mouvement des électrons dans les solides à partir de la mécanique quantique. En particulier, la clé de la supraconductivité se trouve dans la tendance que vont avoir les électrons à se ranger deux par deux. Cet appariement intervient lorsque la température devient suffisamment basse (-272°C pour l'aluminium), obligeant les électrons à adopter un comportement collectif qui leur permet de se déplacer sans aucune résistance dans le métal.

Le mystère s'épaissit

Un véritable choc conceptuel intervient ensuite en 1986 lorsque Karl Müller et Johannes Bednorz découvrirent de la supraconductivité dans une toute nouvelle famille de matériaux à base de cuivre et d'oxygène: les cuprates. Ces céramiques devenaient supra à des températures aussi « hautes » que -150°C , là où un appariement entre les électrons n'était pas du tout attendu ! Le mystère s'épaissit encore lorsque l'on se rend compte que ces matériaux sont de très mauvais conducteurs à la température ambiante. Que se passe-t-il donc lorsque ces matériaux sont refroidis ? Quel mécanisme permet aux électrons de s'apparier et de conduire parfaitement le courant électrique ? Ces questions, vieilles aujourd'hui de 25 ans, sont pleinement d'actualité tant les nombreuses énigmes de ces matériaux dits fortement corrélés restent à résoudre. La terminologie « fortement corrélés » signale le fait que les charges électriques ne

peuvent être simplement regardées individuellement. Au contraire, c'est le comportement collectif dû aux fortes interactions entre les électrons qui est à l'origine de cette nouvelle physique. En parallèle des expériences menées dans de nombreux laboratoires à travers le monde (comme par exemple au Laboratoire national des champs magnétiques intenses à Toulouse), la compréhension des mécanismes en jeu dans cette supraconductivité dite « non-conventionnelle » représente un formidable challenge pour les physiciens théoriciens.

Nouveaux états quantiques

Pour percer ces mystères, l'équipe « fermions fortement corrélés » du Laboratoire de physique théorique (LPT) à l'Institut de recherche sur les systèmes atomiques et moléculaires complexes (IRSAMC) utilise de puissants outils de calcul analytique et surtout de simulations numériques. La clé des phénomènes se situant dans le comportement collectif d'objets quantiques en interaction, la description la plus réaliste possible de ces systèmes complexes nécessite une énorme puissance de calcul. À l'aide de super-calculateurs, basés au LPT et au mésocentre de calcul CALMIP, les chercheurs de l'équipe exploitent et développent plusieurs algorithmes de pointe, tels que la technique Lanczos qui leur permet de diagonaliser de gigantesques matrices contenant plusieurs milliards de nombres, ou encore l'approche de Monte Carlo quantique qui reproduit dans des super-calculateurs la dynamique d'un très grand nombre de particules en interaction. Des concepts nouveaux émergent à travers la problématique des corrélations fortes : nouveaux états quantiques de la matière, magnétisme quantique frustré, intrication quantique... C'est à travers ces idées nouvelles que les outils théoriques se développent et que la créativité permet de s'émanciper des concepts établis. Nous célébrons cette année le centenaire de la découverte de la supraconductivité, mais l'aventure ne fait que commencer !

laflo@irsamc.ups-tlse.fr



>>> De gauche à droite: Fabien ALET, chargé de recherche CNRS; Revaz RAMAZASHVILI, chargé de recherche CNRS; Matthieu MAMBRINI, chargé de recherche CNRS; Sylvain CAPPONI, Professeur UPS; Nicolas LAFLORENCIE, chargé de recherche CNRS; Didier POILBLANC, directeur de recherche CNRS et Pierre PUJOL, Professeur UPS, chercheurs au laboratoire de physique théorique (LPT, unité mixte UPS/CNRS)



>>> Cluster de calcul du LPT

Modélisation des molécules bio-hybrides

Les nanobiotechnologies utilisent des molécules biologiques et bio-hybrides comme matériau et agent structurant et les intègrent dans des nano-dispositifs. L'objectif est de contrôler, voire modifier, les systèmes complexes fournis par la nature et de les coupler aux matériaux traditionnels des technologies (semi-conducteurs, métaux, oxydes). À la clé : des applications variées, au premier rang desquelles, la santé et l'environnement.

Les protéines sont de véritables machines moléculaires, offrant des fonctions spécifiques, sophistiquées et ajustables. Quant aux acides nucléiques, leurs propriétés d'auto-assemblage et d'hybridation offrent des possibilités infinies de nanostructuration. D'où l'idée de détourner ces objets moléculaires pour inventer de nouveaux dispositifs bio-hybrides, dont il faut pouvoir assurer la conception et la fabrication. Encore faut-il pour cela comprendre les mécanismes à l'échelle atomique. Une compréhension fine qui passe nécessairement par la simulation numérique. Mais avec une difficulté : modéliser ces biomolécules et leur intégration dans des milieux non biologiques.

Simulation multi-échelles

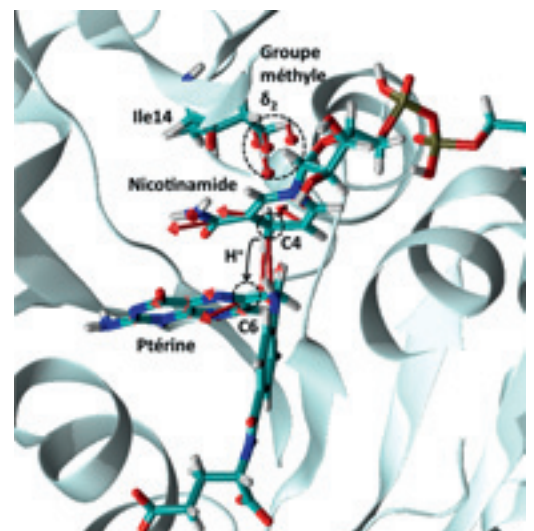
Au sein de l'équipe « nano-ingénierie et intégration des systèmes » du LAAS, objectif est de développer des modèles physiques prédictifs permettant d'anticiper la structure et l'activité des molécules biologiques et bio-hybrides dans un milieu très enclin à les modifier, voire les dénaturer. On développe pour cela une batterie d'outils innovants dédiés à cette problématique, et qui trouveront leur place dans une grande stratégie de simulation multi-échelles. Dans ce cadre, a été conçue la méthode des « Modes Statiques », permettant le calcul des déformations des macromolécules induites par une excitation extérieure, en considérant leur totale flexibilité. L'idée est de l'utiliser directement afin d'explorer les propriétés intrinsèques des molécules en jeu, mais aussi de l'adapter dans une procédure de « docking », c'est-à-dire de prédiction des interactions, pour évaluer l'impact des interactions inter-moléculaires sur la structure et l'activité des partenaires.

Technologies bio-inspirées

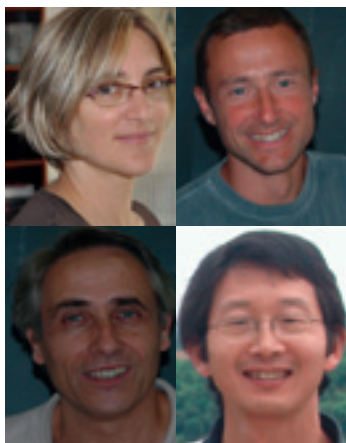
Cette approche et ses extensions sont utilisées sur des exemples biologiques « traditionnels » (en particulier des enzymes pour des applications pharmaceutiques et médicales : protéase du VIH, DHFR...). Des travaux pionniers ont également été engagés dans le domaine des technologies bio-inspirées avec divers champs d'activité : principalement des moteurs moléculaires

(Ca²⁺ ATPase, Myosin, Chaperonine) et des ADN modifiés et fonctionnalisés. Ces calculs permettent d'accompagner les procédés du laboratoire, dirigés actuellement vers le développement de capteurs à aptamères pour le diagnostic médical (cancer...) et le domaine environnement/santé (pollution de l'eau). La conception de ces dispositifs soulève de nombreuses questions, telles que l'influence de l'environnement sur le repliement de l'aptamère, le choix du dispositif de détection et ses effets sur l'aptamère, le mécanisme d'interaction aptamère/cible ou encore la spécificité du capteur et la durée de vie de l'interaction. A ce jour, ces problématiques sont fondamentales et généralisables à tous les processus de couplages fonctionnels biologiques/non-biologiques.

Contact: mbrut@laas.fr



>>> Structure du site catalytique de la Dihydrofolate Réductase. La nicotinamide et la pterine sont localisées, ainsi que leurs atomes C4 et C6 impliqués dans le transfert d'hydruure. Nous avons montré, notamment par des mutations, que le groupe méthyle 2 permet d'ajuster, et ce de façon directionnelle, la distance C4-C6, tenant donc un rôle essentiel dans la catalyse.



Modélisation à l'échelle atomique : défauts et auto-organisation dans les matériaux

Les simulations à l'échelle atomique jouent un rôle prépondérant dans le développement des nanotechnologies et l'élaboration de nouveaux matériaux. La preuve avec trois exemples étudiés par le groupe « matériaux cristallins sous contrainte » du CEMES.

>>> Magali BENOIT, chargée de recherche CNRS, Nicolas COMBE, maître de conférences UPS, Joseph MORILLO, professeur UPS, Hao TANG, chargé de recherche CNRS, au Centre d'élaboration des matériaux et d'études structurales (CEMES, unité propre CNRS associé à l'UPS)

Le verre casse, pas le métal... Celui-ci se déforme facilement sous l'effet des contraintes extérieures. Cette capacité à se déformer sans casser, la ductilité, est due à la présence dans les métaux de défauts, appelés dislocations. Sous une contrainte extérieure, de nouvelles dislocations apparaissent et les dislocations, présentes ou nouvellement créées, se déplacent. D'où, la déformation permanente des métaux. L'étude des dislocations et de leur mouvement est donc essentielle à la compréhension des propriétés mécaniques des métaux. Un certain type de dislocations appelées « vis » jouent un rôle particulièrement important dans certains métaux. Leur structure à l'échelle atomique est impossible à déterminer expérimentalement et les simulations atomistiques apparaissent alors comme un moyen privilégié d'étude. En utilisant des modélisations basées sur la mécanique quantique, les membres de l'équipe ont déterminé la structure atomique et électronique du cœur des dislocations « vis » dans le titane, métal très utilisé dans l'aéronautique. Ces modélisations ont mis en évidence l'existence de nombreuses structures métastables, susceptibles d'expliquer le mécanisme de déplacement de ces défauts pendant la déformation.

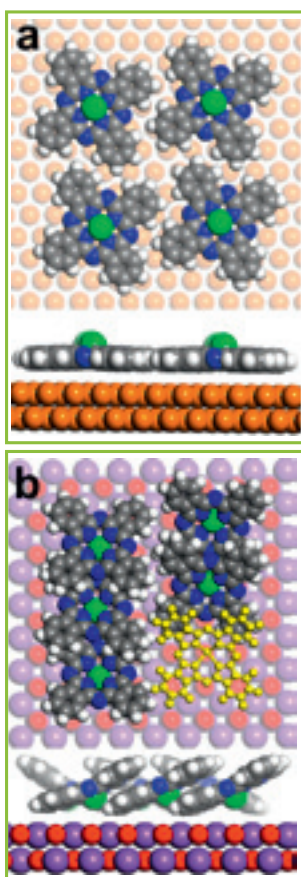
optiques de ces systèmes. Par exemple, les molécules de phtalocyanine (Pc), très utilisées comme colorants ou dans la conversion d'énergie solaire ou encore dans les disques optiques ré-inscriptibles, déposées sur une surface peuvent s'organiser de différentes façons, ce qui va conditionner leur utilisation. Sur une surface d'or, elles s'assemblent dans le plan de surface sous la forme d'un réseau bi-dimensionnel, alors que sur une surface de sel (NaCl), elles forment des îlots tri-dimensionnels. À l'aide de simulations atomistiques (mécanique moléculaire), nous avons montré que l'interaction Pc-or était plus importante que l'interaction Pc-Pc, alors que c'est l'inverse pour la surface de sel.

Ondes acoustiques

À l'image de l'auto-organisation des molécules, l'auto-organisation de structures nanométriques à la surface d'un substrat constitue un axe de recherche important de la physique des semi-conducteurs ou des métaux. Cette approche est d'un grand intérêt technologique car elle pourrait se substituer aux étapes lourdes, coûteuses et délicates de lithographie dans l'industrie électronique. Les techniques actuelles ne permettent souvent qu'un contrôle partiel de l'auto-organisation. En s'appuyant sur des simulations de dynamique moléculaire, les membres du groupe ont récemment proposé une nouvelle technique d'élaboration qui permettrait un contrôle accru de l'auto-organisation à l'échelle nanométrique. Chacun a déjà vu s'organiser des grains de sables sur une plaque métallique vibrante pour former des figures géométriques (figures de Chaldni). Transposant cette idée à l'échelle nanométrique, ils ont montré que lors d'un dépôt atomique, les atomes déposés diffusent sur un substrat soumis à une onde acoustique stationnaire de surface et se positionnent préférentiellement dans le voisinage des ventres de déplacement de l'onde.

Elles s'organisent d'elles-mêmes

Mais la modélisation atomistique a permis de comprendre bien d'autres phénomènes physico-chimiques. Un autre exemple étudié par les chercheurs du CEMES concerne la manière dont certaines molécules s'organisent d'elles-mêmes lorsqu'elles sont déposées sur un substrat. La croissance de molécules organiques sur substrat cristallin est promise à de très nombreuses applications: l'élaboration de LEDs (Light Emission Diode) organiques (faible coût) ou de transistors organiques (Organic Field Effect Transistor). Ces molécules interagissent faiblement entre elles ce qui permet leur auto-organisation à la surface du substrat. Une compréhension fine des interactions molécules-molécules et molécules-surface est nécessaire pour mieux appréhender l'auto-organisation et les propriétés électroniques et



>>> MODÈLES DE CROISSANCE DES MOLÉCULES SNPc (SN-PHTHALOCYANINE). MODÉLISATION PAR MÉCANIQUE MOLÉCULAIRE. (A) SUR UN SUBSTRAT DE Au(111) : LE MODE DE CROISSANCE EST 2D. (B) SUR UNE COUCHE ULTRAFINE DE NaCl(001)/Au(111) : LE MODE DE CROISSANCE EST 3D. (J. AM. CHEM. SOC., 132, 12547, 2010).

Contacts: benoit@cemes.fr, combe@cemes.fr, morillo@cemes.fr, tang@cemes.fr