3PN3160 - Simulation quantique des matériaux

Responsables : **Charles PAILLARD**

Nombre d'heures d'études élèves (HEE) : **45**

Nombre d'heures présentielles d'enseignement (HPE) : **27**

Année académique : **2024-2025**

Niveau avancé : **non**

Présentation, objectifs généraux du cours :

Comprendre les électrons pour mieux concevoir de nouveaux matériaux

Il est aujourd'hui possible de prédire de nombreuses propriétés fonctionnelles de matériaux, sans recours à des données expérimentales. Les théories avancées permettent de concevoir numériquement les matériaux, avant même de les synthétiser. De grandes bases de données de « matériaux numériques » ont ainsi été créées (materialsproject.org). Ainsi, une recherche et un développement de matériaux aux propriétés optimisées est rendu possible à un coût économique et environnemental moindre, alors que l'exploitation de telles bases de données par des techniques de machine learning permettent de découvrir des descripteurs microscopiques permettant d'améliorer les fonctionnalités des matériaux utilisés pour une application donnée.

Une des techniques de modélisation les plus populaires est basée sur la Théorie de la Fonctionnelle Densité (DFT), qui permet de résoudre numériquement le problème quantique d'interaction des électrons. A partir des propriétés des électrons --- responsables des liaisons chimiques ---, il est possible de déduire un grand nombre de propriétés des matériaux. Par exemple, à l'issue de ce cours, vous serez capable de relier les propriétés électriques, magnétiques ou mécaniques d'un matériau à sa structure atomique et donc de comprendre et de quantifier des phénomènes tels que la propagation d'onde sismique au travers de la terre, le spectre infrarouge de vibration des solides pour l'exploration spatiale, les propriétés électroniques formidables du graphène ou pourquoi l'armée de Napoléon s'est retrouvée sans boutons lors de la campagne de Russie.

Dans ce cours, nous nous intéresserons aux fondements et applications de la DFT pour la compréhension et le calcul numérique de multiples propriétés des matériaux (structurelles, magnétiques, thermodynamiques...). Une large part du cours sera dédiée à la pratique.

Période(s) du cours (n° de séquence ou hors séquence) :

SM11

Prérequis :

Mécanique Quantique, Physique du Solide (Crystallographie, Structure de bandes), Thermodynamique

Plan détaillé du cours (contenu) :

- Introduction à la DFT: théorie, implémentation

- DFT: algorithmes, calcul hautes performances
- Interactions noyaux-électrons
- Perturbations de la densité électronique: réponse des matériaux
- Stabilité et transitions de phases: thermodynamique des matériaux
- Propriétés électroniques: magnétisme, isolant ou métal?
- DFT et apprentissage machine

Déroulement, organisation du cours :

Cours magistraux et session pratiques utilisant le code open-source ABINIT

Organisation de l'évaluation :

Présentation orale sur projet de fin de cours avec questions.

Moyens :

- slide de cours et références incluses dans les slides
- travaux pratiques utilisant le code open-source ABINIT (www.abinit.org) pour simuler différentes propriétés de la matière.

Acquis d'apprentissage visés dans le cours :

- Comprendre les fondements théoriques de la DFT issus de la mécanique quantique
- Comprendre l'importance des électrons dans les propriétés fonctionnelles
- Savoir calculer une propriété d'intérêt pour un ou plusieurs matériaux

Description des compétences acquises à l'issue du cours :

Relevant use of a DFT code to model materials properties and critical analysis of the calculated results.