

TouCAM 2017

Toulousaines du Calcul Atomique et Moléculaire

Programme et Abstracts

PROGRAMME

JEUDI 9 NOVEMBRE

08:30-08:50	Accueil
08:50-09:00	Ouverture des Journées TouCAM
09:00-09:45	Session d'ouverture Fernand Spiegelman Nicolas Renon – Jean-Luc Estivalezes
09:45-10:45	Session 1 - Réactivité
10:45-11:10	Pause Café
11:10-12 :30	Session 2 - Méthodes I
12:30-14:30	Buffet - Posters
14:30-15:10	Session invité I Patrice Malfreyt
15:10-15:50	Session 3 - Matériaux I
15:50-16:20	Pause Café
16:20-17:20	Session 4 - Matériaux II
18:00	Mixing event

VENDREDI 10 NOVEMBRE

09:30-10:10	Session invité II Layla Martin Samos
10:10-10:40	Pause Café
10:40-12:00	Session 5 - Dynamique
12:00-14:00	Buffet - Posters
14:00-14:40	Session 6 - Méthodes II
14:40-15:40	Session 7 - Etats Excités
15:40	Conclusion

SOMMAIRE

**P5
BIENVENUE**

**P61
PARTICIPANTS**

**P7
PROGRAMME**

SCIENTIFIQUE

**P15
INVITES**

**P64
COMITES**

**P21
ORAUX**

**P65
SPONSORS**

**P43
POSTERS**

**P66
INFORMATIONS PRATIQUES**

**P57
LABORATOIRES
PARTICIPANTS**

BIENVENUE

En 2015, la première édition des TouCAM a permis de réunir 80 participants venant de 15 laboratoires toulousains.

Pour cette seconde édition, ces journées sont élargies aux chercheurs de la région Occitanie et de Pau, concepteurs et utilisateurs de méthodes numériques spécifiques au calcul atomique et moléculaire.

Elles visent en premier lieu à favoriser les interactions et renforcer les liens entre des équipes dispersées sur la région et très diverses au niveau des méthodes et des applications. L'objectif est double : faire connaître et partager les méthodes utilisées et/ou développées, allant de la structure électronique aux problématiques multi-échelles, et par ailleurs identifier et échanger sur les sujets de recherche de chacun.

Ce partage doit permettre de développer la mutualisation des outils, des acquis, mais aussi de faciliter et d'initier des collaborations sur des sujets novateurs.

Les TouCAM 2017 sont labellisées "ESOF 2018 - Toulouse, Cité européenne de la Science".

Principales thématiques :

- Développements et méthodes
- Dynamique
- Matériaux
- Réactivité
- Etats excités

JEUDI 9 NOVEMBRE

08:30-08:50	Accueil
08:50-09:00	Ouverture des Journées TouCAM Fabienne Alary (LCPQ)
09:00-09:45	Session d'ouverture Modérateur : Marie Brut (LAAS) 09:00 O1. Présentation du CFCAM-FR-GSO Fernand Spiegelman (CFCAM-FR-GSO & LCPQ) 09:15 O2. Présentation du MésoCentre CALMIP Nicolas Renon – Jean-Luc Estivalezes (CALMIP)
09:45-10:45	Session 1 – Réactivité Modérateur : Nadine Halberstadt (LCAR) 09:45 O1. Caractérisation expérimentale et théorique d'oligomères d'amidure de zinc ou d'étain formés durant la synthèse de nanoparticules d'oxyde métallique - Christine Lepetit (LCC) 10:05 O2. Terminal Uranium sulfido and hydrosulfido complexes: Theoretical study of the uranium sulfur bond - Carlos Alvarez Lamsfus (LPCNO) 10:25 O3. The effect of external electric field on Ru(DBM) ₂ molecule: A quantum chemical analysis - Amine Moukapir (CEMES)
10:45-11:10	Pause Café
11:10-12:30	Session 2 – Méthodes I Modérateur : A confirmer 11:10 O4. Dressing the CI matrix with explicit correlation - Pierre-Francois Loos (LCPQ) 11:30 O5. Hybrid stochastic-deterministic calculation of the second-order perturbative contribution of multireference perturbation theory - Yann Garniron (LCPQ) 11:50 O6. Modeling quantum mechanics by a set of interacting trajectories - Lidice Cruz-Rodriguez (LCAR) 12:10 O7. Hybrid parallelization of the Multi-TRRT algorithm: Application to highly-flexible biomolecules - Alejandro Estana (LAAS)
12:30-14:30	Buffet - Posters

14:30-15:10	Session invité I Modérateur : Anne Hémerlyck (LAAS) O13. Développement d'une stratégie de simulation moléculaire multi-échelles : application aux matériaux polymères - Patrice Malfreyt (ICCF, Labo Commun SiMatLab)
15:10-15:50	Session 3 – Matériaux I Modérateur : Anne Hémerlyck (LAAS) 15:10 O8. Simulation multi-échelle de l'influence de l'irradiation sur les composants électroniques - Antoine Jay (ISAE) 15:30 O9. Diffusion des interstitiels dans les métaux - Damien Connétable (CIRIMAT)
15:50-16:20	Pause Café
16:20-17:20	Session 4 – Matériaux II Modérateur : Magali Benoit (CEMES) 16:20 O10. Importance d'un traitement purement quantique des propriétés de fractionnement isotopique à l'équilibre des espèces ioniques dissoutes: le cas de Li ⁺ (aq) - Merlin Méheut (GET) 16:40 O11. Fractionnement isotopique du zinc entre minéral et solution par calcul DFT - Marc Blanchard (GET) 17:00 O12. Étudier la dynamique et le confinement des ions dans les supercondensateurs par des simulations - Céline Merlet (CIRIMAT)
18:00	Mixing event

VENDREDI 10 NOVEMBRE

09:30-10:10	<p>Session invité II Modérateur : Jérôme Cuny (LCPQ)</p> <p>O14. Modeling versus experiments, understanding, reproducing and/or predicting? - Layla Martin Samos (CNR et Univ Nova Gorica)</p>
10:10-10:40	<p>Pause Café</p>
10:40-12:00	<p>Session 5 – Dynamique Modérateur : Jérôme Cuny (LCPQ)</p> <p>10:40 O13. Modélisation de systèmes membranaires par modélisation Gros-Grains : de l'échelle nano à la dimension meso - Matthieu Chavent (IPBS)</p> <p>11:00 O14. Distribution de l'eau dans le site catalytique des oncoprotéines NRas - Ruth Tichauer (LAAS)</p> <p>11:20 O15. Modeling of Interaction between the Focal Adhesion Kinase (FAK) and Protein Kinase C theta (PKCθ) - Georges Czaplicki (IPBS)</p> <p>11:40 O16. Molecular alignment of CH₃-⁴He - Patricia Vindel-Zandbergen (LCAR)</p>
12:00-14:00	<p>Buffet - Posters</p>
14:00-14:40	<p>Session 6 – Méthodes II Modérateur : Christophe Raynaud (ICGM)</p> <p>14:00 O17. Méthodes CASSCF, RASSCF et GASSCF - Nadia Ben Amor (LCPQ)</p> <p>14:20 O18. Implémentation et calculs de spectres IR et Raman au-delà de l'approximation harmonique pour les systèmes périodiques (polymère, surface, cristal) - Philippe Carbonnière (IPREM)</p>
14:40-15:40	<p>Session 7 – Etats Excités Modérateur : Christophe Raynaud (ICGM)</p> <p>14:40 O19. Second-order difference density matrices for effective orbital relaxation - Topological insights - Thibaud Etienne (ICGM)</p> <p>15:00 O20. La méthode 'Nudged Elastic Band' : un outil puissant en photochimie théorique - Isabelle Dixon (LCPQ)</p> <p>15:20 O21. Propriétés structurales et photophysiques du 3-hexylthiophène (P3HT) : études expérimentales et théorique combinées - Léa Farouil (LCPQ)</p>
15:40	<p>Conclusion</p>

LISTE DES CONTRIBUTIONS ORALES

- O11. Présentation du CFCAM-FR-GSO** - Fernand Spiegelman (CFCAM-FR-GSO & LCPQ)
- O12. Présentation du MésoCentre CALMIP** - Nicolas Renon, Jean-Luc Estivalezes (CALMIP)
- O13. Développement d'une stratégie de simulation moléculaire multi-échelles : application aux matériaux polymers** - Patrice Malfreyt (ICCF, Labo Commun SiMatLab)
- O14. Modeling versus experiments, understanding, reproducing and/or predicting?** - Layla Martin Samos (CNR et Univ Nova Gorica)

O1. Caractérisation expérimentale et théorique d'oligomères d'amidure de zinc ou d'étain formés durant la synthèse de nanoparticules d'oxyde métallique - Christine Lepetit (LCC)

O2. Terminal Uranium sulfido and hydrosulfido complexes: Theoretical study of the uranium-sulfur bond - Carlos Alvarez Lamsfus (LPCNO)

O3. The effect of external electric field on Ru(DBM)² molecule: A quantum chemical analysis - Amine Moukapir (CEMES)

O4. Dressing the CI matrix with explicit correlation - Pierre-Francois Loos (LCPQ)

O5. Hybrid stochastic-deterministic calculation of the second-order perturbative contribution of multireference perturbation theory - Yann Garniron (LCPQ)

O6. Modeling quantum mechanics by a set of interacting trajectories - Lidice Cruz-Rodriguez (LCAR)

O7. Hybrid parallelization of the Multi-TRRT algorithm: Application to highly-flexible biomolecules - Alejandro Estana (LAAS)

O8. Simulation multi-échelle de l'influence de l'irradiation sur les composants électroniques - Antoine Jay (ISAE)

O9. Diffusion des interstitiels dans les métaux - Damien Connétable (CIRIMAT)

O10. Importance d'un traitement purement quantique des propriétés de fractionnement isotopique à l'équilibre des espèces ioniques dissoutes: le cas de Li⁺(aq) - Merlin Méheut (GET)

O11. Fractionnement isotopique du zinc entre minéral et solution par calcul DFT - Marc Blanchard (GET)

O12. Étudier la dynamique et le confinement des ions dans les supercondensateurs par des simulations - Céline Merlet (CIRIMAT)

- O13. Modélisation de systèmes membranaires par modélisation Gros-Grains : de l'échelle nano à la dimension meso** - Matthieu Chavent (IPBS)
- O14. Distribution de l'eau dans le site catalytique des oncoprotéines NRas** - Ruth Tichauer (LAAS)
- O15. Modeling of Interaction between the Focal Adhesion Kinase (FAK) and Protein Kinase C theta (PKC θ)** - Georges Czaplicki (IPBS)
- O16. Molecular alignment of CH₃I-⁴He** - Patricia Vindel-Zandbergen (LCAR)
- O17. Méthodes CASSCF, RASSCF et GASSCF** - Nadia Ben Amor (LCPQ)
- O18. Implémentation et calculs de spectres IR et Raman au-delà de l'approximation harmonique pour les systèmes périodiques (polymère, surface, cristal)** - Philippe Carbonnière (IPREM)
- O19. Second-order difference density matrices for effective orbital relaxation - Topological insights** - Thibaud Etienne (ICGM)
- O20. La méthode 'Nudged Elastic Band' : un outil puissant en photochimie théorique** - Isabelle Dixon (LCPQ)
- O21. Propriétés structurales et photophysiques du 3-hexylthiophène (P3HT) : études expérimentale et théorique combinées** - Léa Farouil (LCPQ)

LISTE DES CONTRIBUTIONS POSTERS

- P1. Computational Protein Design to accelerate the conception of fine-tuned biomolecules** - Simoncini David, Clément Viricel, Antoine Charpentier, Seydou Traoré, Simon de Givry, Kam Y.J. Zhang, David Mignon, Thomas Simonson, Juan Cortés, Isabelle André, David Allouche, Thomas Schiex and Sophie Barbe
- P2. Computational study and prediction of enzyme-carbohydrate interactions to assist the development of novel chemo-enzymatic routes towards O-antigenic oligosaccharides** - Akli Ben Imeddourene, Sophie Barbe, Jeremy Esque, Mounir Benkoulouche, Claire Moulis, Laurence Mulard, Magali Remaud-Siméon and Isabelle André
- P3. Etude DFT de la réduction catalytique sélective de NO₂ par NH₃ dans la Cu-SSZ-13** - Boutheïna Kerkeni, Céline Chizallet, David Berthout, Dorothée Berthomieu
- P4. Multi-scale study of the influence of impurities on the oxygen solubility in nickel** - M. David, D. Monceau, D. Connétable
- P5. Simulations en dynamique moléculaire des liquides expansés par un gaz** - Granero Fernandez Emanuel, Condoret Jean-Stéphane, Gerbaud Vincent, Medina-Gonzalez Yaocihuatl
- P6. SEQUESTER: A Software Tool for the Analysis of Enzyme Sequence Structure and Function Correlation** - Christopher M. Topham, Jérémy Esque and Isabelle André
- P7. Des nano-conjugués d'or contre l'antibiorésistance: relations morphologie-stabilité** - Xavier Fenouillet, Magali Benoit, Nathalie Tarrat
- P8. Atomic scale modeling to understand how matter organizes during growth of ultrathin materials in close relation with elaboration process parameters: climbing the scales** - Mathilde Guiltat, Nicolas Salles, Nicolas Richard, Marie Brut, Georges Landa, Anne Hemeryck
- P9. Strain-driven diffusion process during silicon oxidation investigated by coupling Density Functional Theory and Activation Relaxation Technique** - Nicolas Salles, Nicolas Richard, Normand Mousseau, Anne Hemeryck
- P10. Simulation multi-échelle de l'influence de l'irradiation sur les composants électroniques** - Antoine Jay, Nicolas Richard, Anne Hemeryck, Layla Martin-Samos, Normand Mousseau, Vincent Goiffon, Mélanie Raine
- P11. Implémentation des polarisabilités distribuées sur les centroïdes des orbitales localisées dans le package TINKER** - E. Norbert-Agaisse, N. Gresh, J-P. Piquemal



OI1 – Présentation du CECAM-FR-GSO

Fernand Spiegelman



Le **CECAM** (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire) a été fondé à Paris en 1969 par le Dr Carl Moser. C'est une organisation dédiée à la promotion de la recherche fondamentale sur les méthodes de calcul avancées et leur application à des problèmes à la frontière de la science et de la technologie. Ainsi que le nom le suggère, la thématique traditionnelle du **CECAM** était la simulation à l'échelle atomique et moléculaire en chimie et en physique de la matière condensée. Depuis une vingtaine d'années, les progrès considérables des technologies des ordinateurs, des logiciels et du calcul haute performance ont permis l'extension de ces méthodes à une large palette d'applications en sciences des matériaux, nanosciences, chimie et physique moléculaire, biologie et chimie pour la santé. L'expérimentation numérique est désormais considérée comme une troisième voie pour aborder la science, une nouvelle manière de relier expérience et théorie. Ainsi, l'importance de la simulation continue à croître dans de nombreux domaines émergents et le **CECAM** a fait évoluer sa structure et ses thématiques pour aborder de nouvelles stratégies, par exemple la modélisation multi-échelle ou multi-méthodes ou les apports de la physique statistique à la simulation (modélisation, analyse des données). Le **CECAM** est actuellement constitué de 18 nœuds en Europe en plus de son centre à Lausanne (<http://www.cecam.org>).

Les activités des nœuds **CECAM** couvrent l'organisation d'ateliers scientifiques (workshops) de niveau international dans des domaines en évolution ou émergents, des tutoriaux et écoles spécialisées à l'attention des jeunes chercheurs, doctorants et postdoctorants, des ateliers dédiés aux développements logiciels, ou encore au brain-storming et à la résolution de problèmes spécifiques, la germination de projets collaboratifs en Europe (et au-delà). Nous encourageons les propositions d'ateliers et d'écoles de la part de toute la communauté intéressée par le calcul numérique et la simulation dans les thématiques du **CECAM**.



- **CECAM-FR-GSO** : un des trois nœuds **CECAM** en France
- Géré à l'IRSAMC, Université de Toulouse Paul Sabatier (<http://www.irsamc.ups-tlse.fr/cecam>)
- Support institutionnel : Université de Toulouse (UPS), CNRS, CEA Marcoule et Université de Pau et des pays de l'Adour. Partenariat avec CALMIP et le Labex NEXT
- Le **CECAM-FR-GSO** organise des workshops, tutoriaux et écoles et soutient des événements dans la région Grand Sud-Ouest

OI2. Le mésocentre régional CALMIP

Jean-Luc Estivalezes^{1*}, Nicolas Renon^{1**}

¹ CALMIP, Espace Clément ADER, 3 rue Caroline Aigle, 31400 TOULOUSE

* jean-luc.estivalezes@imft.fr

** nicolas.renon@univ-tlse3.fr

CALMIP est aujourd'hui le premier mésocentre de calcul inter-universitaire en France, au service des recherches académiques et privées en région Occitanie. 200 projets de recherche, impliquant plus de 500 chercheurs de 30 laboratoires, calculent quotidiennement sur CALMIP. Nous présenterons dans un premier temps les principales caractéristiques du mésocentre, sa structuration, son fonctionnement, son système de Calcul et de Stockage (ATLAS). Nous ferons un point sur la procédure de renouvellement du système de Calcul en cours (projet CADAMIP), ainsi que sur le programme national SIMSEO pour la promotion du Calcul Haute Performance auprès des PME. Dans une deuxième partie, nous aborderons à travers les différentes générations de systèmes de calcul CALMIP, l'évolution des architectures des processeurs. Processeurs multi-core, vectorisation, quels sont les moteurs de l'accroissement de puissance des processeurs (nombre d'opération en virgule flottante par seconde : flops/s - Loi de Moore) ? La performance des Applications Scientifiques suit-elle la performance des processeurs ? Nous ferons un focus particulier sur des codes de calculs issus de la Mécanique des fluides et de la Physico-Chimie des Matériaux. Nous donnerons des éléments d'analyse pour expliquer les comportements des codes sur les architectures processeurs actuelles, en particulier en ce qui concerne la vectorisation. Enfin nous terminerons par les tendances matérielles futures.



Figure. Le Supercalculateur EOS et le système de stockage ATLAS.

O13. Développement d'une stratégie de simulation moléculaire multi-échelles : application aux matériaux polymères

K. Kempfer^{1,2}, Gaëtan Maurel², Marc Couty², Benoit Schnell¹, Patrice Malfreyt^{2*}

¹ Manufacture Française des Pneumatiques Michelin, Centre de Ladoux, 23 place des Carmes, 63040 Clermont-Ferrand.

² Université Clermont Auvergne, CNRS, SIGMA Clermont, Institut de Chimie de Clermont-Ferrand (ICCF), 63000 Clermont-Ferrand, France.

* Patrice.Malfreyt@uca.fr

Le design de matériaux polymères, nanocomposites de surcroît, nécessite de pouvoir les décrire le plus précisément possible à leurs différentes échelles caractéristiques. Les temps de relaxation associés s'étendent sur une large gamme, allant de la picoseconde à la seconde. Une description unique de la matière ne permet pas l'étude de l'ensemble des phénomènes physico-chimiques associés aux polymères. Une solution, qualifiée d'approche « bottom-up », consiste à s'affranchir progressivement des degrés de liberté de l'échelle atomique pour accéder aux échelles supérieures (**Figure 1**). Différentes techniques de modélisation « bottom-up » ont été développées (modèles gros-grain réalistes, slip-link, ...).

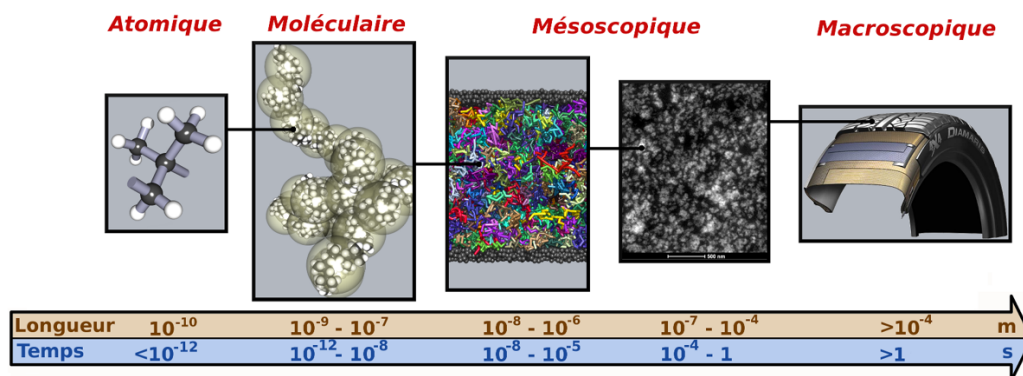


Figure. Différentes descriptions de la matière pour rendre compte des échelles spatiales et temporelles nécessaires pour aboutir à la compréhension des propriétés de matériaux polymères.

La possibilité de concevoir des matériaux polymères aux propriétés spécifiques à partir d'une description des interactions au niveau moléculaire et de la microstructure passe alors par l'utilisation de méthodes de simulations moléculaires. Il est alors possible d'appliquer une démarche « bottom-up » consistant à construire des potentiels gros grains à partir de configurations issues de simulations atomistiques. Nous proposons de présenter quelques résultats de la stratégie multi-échelle que nous développons dans le cadre de la reproduction de propriétés mécaniques et thermodynamiques de différents fondus de polymères. Nous aborderons le cas de l'interaction de chaînes de polymères avec une surface et l'aptitude des modèles gros grains à renseigner au niveau structural et énergétique de l'impact de la surface et du confinement.

Mots-clés : simulation atomistique, simulation mésoscopique, potentiels gros grains.

Prof. Patrice Malfreyt

Patrice Malfreyt a obtenu sa thèse en Chimie Physique sur la simulation moléculaire de molécules à intérêt biologique en 1995. Après un séjour post-doctoral à Imperial College dans l'équipe du Professeur Dominic J. Tildesley, il a été recruté dans le laboratoire de Thermodynamique où il est Professeur depuis 2004. Son domaine de spécialité est la **chimie théorique** et plus précisément la **simulation moléculaire** qui utilise une description classique des interactions. Son champ de compétences s'est alors développé autour de la **thermodynamique statistique**, des méthodologies de simulation (Monte Carlo, dynamique moléculaire, et dynamique des particules dissipatives) et des potentiels d'interactions aux échelles moléculaires et mésoscopiques. Plus récemment, il développe à une stratégie multi-échelle dans le but de calculer des propriétés de systèmes interfaciaux et macromoléculaires inaccessibles par une description des interactions à l'échelle atomique. Patrice Malfreyt est responsable du groupe de Thermodynamique et Interactions Moléculaires de l'Institut de Chimie de Clermont Ferrand (15 permanents), directeur du laboratoire commun privé-public SIMATLAB (co-directeur B. Schnell) avec Michelin et Président de la Division de Chimie Physique (DCP) depuis 2016, division commune aux deux sociétés savantes SCF et SFP. Il est également Directeur de l'Ecole Doctorale des Sciences Fondamentales depuis 2012 et du Collège des Ecoles Doctorales du site clermontois depuis 2016.



SiMatLab - *Le groupe Michelin et l'Institut de Chimie de Clermont-Ferrand (ICCF : Université Clermont Auvergne / SIGMA Clermont / CNRS) créent le laboratoire commun de recherche public-privé SimatLab, dédié à la modélisation des matériaux polymères.*

Pour accélérer la conception de nouveaux matériaux, il est fondamental de savoir les modéliser et simuler leurs comportements. C'est le sujet de recherche de SimatLab dont l'objectif est d'établir une approche multi-échelle, de l'atome jusqu'au macroscopique, qui permettra d'interpréter les propriétés des matériaux polymères à partir de leur structure et de leur comportement à l'échelle atomique. Le challenge scientifique est de démontrer le caractère prédictif du numérique pour la conception des matériaux de rupture. Pour cela, ce laboratoire élaborera de nouvelles méthodologies et protocoles de simulation moléculaire sur différents types de matériaux modèles en couplage permanent avec l'expérience, afin de valider l'approche numérique développée.

Comprendre les mécanismes physico-chimiques dans des matériaux polymères complexes nécessite une bonne description des différentes échelles (atomistique, mésoscopique, macroscopique) caractéristiques de ces systèmes. Ainsi, l'un des principaux verrous est d'assurer à l'échelle supérieure (mésoscopique par exemple), une description suffisante de l'échelle inférieure pour conserver les spécificités chimiques des constituants. Développer une stratégie multi-échelle est donc indispensable pour transférer les informations à travers les différentes échelles, et pour pouvoir aboutir ainsi à l'obtention des propriétés macroscopiques de ces matériaux.

SimatLab vient renforcer et pérenniser l'activité de modélisation des matériaux polymères de l'ICCF tout en bénéficiant de d'adossement à un groupe de visibilité internationale. Ce partenariat avec Michelin permettra d'ouvrir les activités de recherche de l'ICCF vers de nouveaux domaines d'application en s'appuyant sur une synergie entre les chercheurs de l'ICCF et du groupe Michelin et aussi sur de nouveaux personnels recrutés spécialement pour ce projet. Ces travaux collaboratifs public/privé représentent un véritable défi scientifique et une source d'enrichissement pour l'avenir.

Ce laboratoire, créé le 22 Mai 2017, réunit l'Institut de Chimie de Clermont-Ferrand et le groupe Michelin. Les tutelles de ce laboratoire sont l'Université Clermont Auvergne, CNRS et SIGMA Clermont. L'ICCF met à disposition dans SimatLab 4 personnels permanents (3 UCA + 1 CNRS) et Michelin 4 ingénieurs de recherche. 3 thèses et 3 stages post-doctoraux viendront compléter l'effectif du laboratoire. Un chercheur confirmé sera également recruté selon une procédure Tenure Track.

OI4. Modeling versus experiments, understanding, reproducing and/or predicting?

Layla Martin-Samos^{1*}

¹ *CNR-IOM Democritos and University of Nova Gorica*

* *lmartinsamos@gmail.com*

With the increased of computing power and the boom of multi-disciplinary, computational materials scientists are often facing with the Salomon question of understanding or reproducing? i.e. should we go for simplified (model) systems thus to identify fundamental/primary phenomena or should we develop more and more sophisticated modeling approaches such that the complexity level allows for reproducing a given measure? Moreover, how much general or specific should be the modeling approach to be predictive? Of course, the answers to these questions are not unique and depend on the system. Using three research examples, Peroxy bridges in SiO₂, Surface Core Level Shifts in Magnesium Surfaces and Super Atomic Molecular states in corannulene, I will discuss the difficulties in finding an equilibrium between understanding, reproducing and/or predicting experimental measures.

Dr Layla Martin-Samos

Dr. Layla Martin-Samos is a researcher from the Italian National Research Council (CNR-IOM Democritos) and is assistant Professor at the University of Nova Gorica, Slovenia. After a PhD in Computational Material Science in Paris (2004) devoted to the modeling of defects in amorphous SiO₂ from first-principles, Layla Martin-Samos moved to the INFM-S3 center in Modena (Italy) where she developed SaX (Self-energies And eXitations) software package based on Many-Body Perturbation Theory. SaX was the first Open Source freely available software released (GPL) for the modeling of electronic excitations, including optical excitations, within the GW approximation and the Bethe-Salperter Equation. In 2009, she moved to Trieste (Italy) where she worked as development scientist for Quantum-ESPRESSO. In 2012 she became assistant Professor at the University of Nova Gorica (Slovenia) in the Materials Research Laboratory. Her research interests goes from software development, refactoring and optimization to connection between theory and experiments, including multi-scaling and methodological developments. She is actively involved in a longstanding collaboration devoted to understand and model defects and irradiation effects in semiconductors and insulators. She is authoring/co-authoring of more than 40 papers published in peer reviewed international journals with an h-index of 13 (WoS 2017).

01. Caractérisation expérimentale et théorique d'oligomères d'amidure de zinc ou d'étain formés durant la synthèse de nano-particules d'oxyde métallique

Christine Lepetit*¹, Myrtil L. Kahn¹, Zhihua Zhao¹, Pierre Lecante², Jean-Daniel Marty³, Christophe Mingotaud³

¹Laboratoire de Chimie de Coordination, CNRS UPR 8241, 31077 Toulouse.

²CNRS, Centre d'Elaboration des Matériaux et d'Etudes Structurales, 31055 Toulouse.

³Laboratoire des IMRCP, CNRS UMR 5623, Université Paul Sabatier, 31062 Toulouse Cedex 09.

*christine.lepetit@lcc-toulouse.fr

L'hydrolyse d'un précurseur organométallique en présence d'amines à longues chaînes alkyles, permet de préparer des nanoparticules d'oxyde de zinc ou d'étain de taille et de morphologie contrôlées.^{1,2} Les spectres RMN et les Fonctions de Distribution de Paires (PDF) suggèrent la formation de structures oligomères par déprotonation de l'amine en ligand amidure, capable de ponter deux centres métalliques.²

Des structures d'oligomères d'amidures de zinc, contenant jusqu'à 12 atomes métalliques, ont été calculées au niveau PBE-D3/DGDZVP (voir Figure ci-dessous) et un mécanisme d'oligomérisation a été proposé. La comparaison des fonctions de distribution de paires expérimentales et calculées permet de faire un tri parmi les différentes structures et tailles d'oligomères d'amidure d'étain et de zinc calculées et de proposer une structure expérimentale possible.

Les différentes liaisons métal-azote et métal-alkyle (M = Zn ou Sn) ont été finement caractérisées par analyse topologique ELF (Electron Localization Function) et QTAIM (Quantum Theory of Atoms in Molecules). Des descripteurs de réactivité chimique (Indices de Fukui ou descripteur dual), condensés sur les bassins ELF et QTAIM permettent de mettre en évidence la nature et la réactivité particulière des liaisons métal-amidure terminales par rapport aux liaisons pontantes des oligomères d'amidure de zinc.

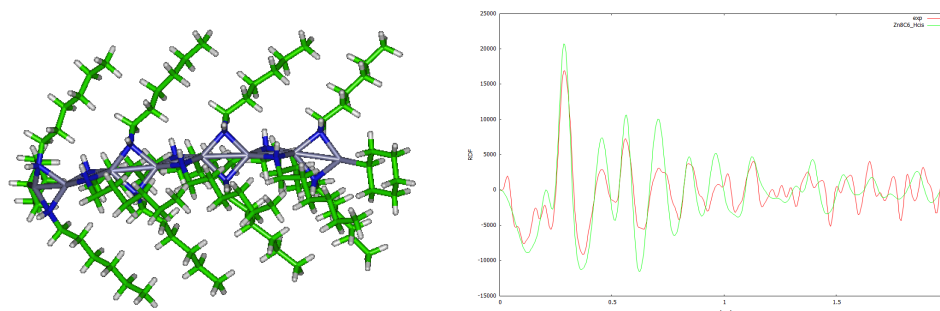


Figure. Oligomère d'amidure de zinc calculé au niveau PBE-D3/DGDZVP correspondant à la PDF calculée (en vert) qui présente le meilleur accord avec la PDF expérimentale (en rouge).

Mots-clés : Nanoparticules d'oxydes métalliques. Oligomères d'amidures de zinc ou d'étain. Fonction de Distribution de Paires (PDF). Analyses topologiques QTAIM et ELF.

Références

- 1 M. L. Kahn, A. Glaria, C. Pages, M. Monge, L. Saint Macary, A. Maisonnat, B. Chaudret, *J. Mater. Chem* 19 4044 (2009).
- 2 Z. Zhao, Y. Coppel, J. Fitremann, P. Fau, C. Roux, C. Lepetit, P. Lecante, J.-D. Marty, C. Mingotaud, M. L. Kahn, soumis.

O2. Terminal Uranium sulfido and hydrosulfido complexes: Theoretical study of the uranium-sulfur bond

Carlos Alvarez Lamsfus ^{1*}, Laurent Maron ¹

¹ CNRS, INSA, UPS, UMR 5215, LPCNO University de Toulouse 135 avenue de Rangueil Toulouse 31077 (France)

* c_alvare@insa-toulouse.fr

Actinide complexes containing terminal chalcogen ligands involved in multiple bonding with actinide ions are, currently, of high interest, due to both their electronic structures and potential applications in atom transfer chemistry and catalysis. Thanks to these compounds, it is possible to have, for example, selective complexation and separation of actinides and lanthanides in spent nuclear fuel. However, in contrast to the rapidly increasing number of terminal uranium oxo complexes, the number of fully characterized terminal uranium sulfido complexes is quite limited.

Thanks to Density Functional Theory (DFT) calculations and Natural Bond Orbitals (NBO) analysis, it's possible to study the bond between uranium and sulfur of these complexes. In this particular case, an atypical strongly polarized triple bond was found in the Uranium terminal sulfido complex with a set of specific ligands^{1,2}, like the one depicted in the figure. Comparing these ligands, it's obvious their importance in the chemical properties of the U-S bond and how they affect the terminal sulfide and the hydrosulfides.

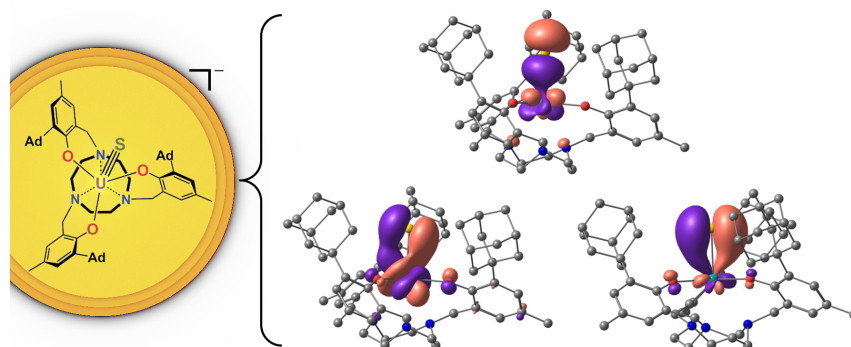


Figure. σ and π molecular orbitals for the terminal Sulfur Uranium species

Mots-clés : DFT, molecular orbitals, bonding analysis, Uranium, chalcogenes

Références

- 1 M. W. Rosenzweig, A. Scheurer, C. Alvarez Lamsfus, F. W. Heinemann, L. Maron, J. Andrez, M. Mazzanti, K. Meyer, *Chem. Sci.* 7, 5857 (2016)
- 2 J. Andrez, J. Pécaut, R. Scopelliti, C. E. Kefalidis, L. Maron, M. W. Rosenzweig, K. Meyer, M. Mazzanti, *Chem. Sci.* 7, 5846 (2016)

O3. The effect of external electric field on Ru(DBM)₂ molecule: A quantum chemical analysis

Amine Moukapir ^{1*}, Mohamed Hliwa¹, Véronique Langlais¹, Jacques Bonvoisin¹

¹ CEMES, CNRS UPR 8011, 29 rue Jeanne Marvig, BP 94347, 31055 Toulouse cedex 4, France

* amine.moukapir@gmail.com

In this work we present the results of a Quantum Chemical study combined with a classical electrostatic calculation of the effective electric field applied on the Ru(DBM)₂ molecule, in different state of charge : [Ru(DBM)₂]⁰ and [Ru(DBM)₂]¹⁺. Quantum Chemical calculation was performed using MOPAC© (Molecular Orbital Package) code, at the PM6 (Parametric method number 6) ¹ level of theory, which is a semi-empirical Self-Consistent Field theoretical method. In the 1st charge state i.e. [Ru(DBM)₂]⁰, the singlet and the triplet spin states were studied, whereas in the 2nd charge state i.e. [Ru(DBM)₂]¹⁺ we were interested in the doublet and quartet spin states. We have noticed, from different correlation diagrams, that in all spin state cases and in the presence of a varying external electric field, molecular orbitals are either energy shifted or mixed together, giving birth to new set of quantum states. For such states mixtures, we have determined the underlying qualitative rules, by means of symmetry group theory and quantitative proportions, by means of the formalism of quantum mechanics.

Mots-clés : PM6, electric field, quantum state, spin state, molecular orbital, correlation diagrams

Références

1 James J. P. Stewart, J Mol Model 13 1173-1213 (2007)

O4. Dressing the CI matrix with explicit correlation

Pierre-François Loos * ^{1,2}, Anthony Scemama ¹, Michel Caffarel ¹

¹ *Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques, Université de Toulouse, CNRS, UPS, France*

² *Research School of Chemistry, Australian National University, ACT 2601, Australia*

* *loos@irsamc.ups-tlse.fr*

One of the most fundamental problem of conventional electronic structure methods is their slow energy convergence with respect to the size of the one-electron basis set. As pioneered by Kutzelnigg,¹ one way to speed up the convergence of such methods is to introduce explicitly the correlation between electrons via a correlation factor f_{12} , leading to a prominent improvement of the energy convergence from L^3 to L^7 (where L is the maximum angular momentum of the one-electron basis). This gave birth to the so-called explicitly-correlated F12 methods which can achieve chemical accuracy for small organic molecules with relatively small Gaussian basis sets.^{2,3}

In this talk, following Kutzelnigg's seminal idea, we propose to show that one can introduce the explicit correlation between electrons within the configuration interaction (CI) method via a dressing of the CI matrix. Compared to other explicitly-correlated methods, this dressing strategy has the advantage of introducing the explicit correlation at a low computational cost. The present idea is completely general and can be applied to any type of truncated, full, or even selected CI method.⁴ Illustrative examples will be given for atomic and molecular systems.

Mots-clés : configuration interaction method, explicitly-correlated method, Effective Hamiltonian.

Références

1 W. Kutzelnigg, *Theor. Chem. Acc.* 68, 445 (1985)

2 C. Hattig, W. Klopper, A. Kohn, D. P. Tew, *Chem. Rev.* 112, 4 (2012)

3 L. Kong, F. A. Bishop, E. F. Valeev, *Chem. Rev.* 112, 75 (2012)

4 M. Caffarel, T. Applencourt, E. Giner, A. Scemama, *J. Chem. Phys.* 144, 151103 (2016)

05. Hybrid stochastic-deterministic calculation of the second-order perturbative contribution of multireference perturbation theory¹

Yann Garniron^{1*}, Anthony Scemama¹, Pierre-François Loos¹, Michel Caffarel¹

¹ *Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques, Université de Toulouse, CNRS, UPS, Toulouse, France*

* *garniron@irsamc.ups-tlse.fr*

A hybrid stochastic-deterministic approach for computing the second-order perturbative contribution $E^{(2)}$ within multireference perturbation theory (MRPT) is presented. The idea at the heart of our hybrid scheme—based on a reformulation of $E^{(2)}$ as a sum of elementary contributions associated with each determinant of the MR wave function—is to split $E^{(2)}$ into a stochastic and a deterministic part. During the simulation, the stochastic part is gradually reduced by dynamically increasing the deterministic part until one reaches the desired accuracy. In sharp contrast with a purely stochastic Monte Carlo scheme where the error decreases indefinitely as $t^{-1/2}$ (where t is the computational time), the statistical error in our hybrid algorithm displays a polynomial decay $\sim t^{-n}$ with $n = 3-4$ in the examples considered here. If desired, the calculation can be carried on until the stochastic part entirely vanishes. In that case, the exact result is obtained with no error bar and no noticeable computational overhead compared to the fully deterministic calculation.

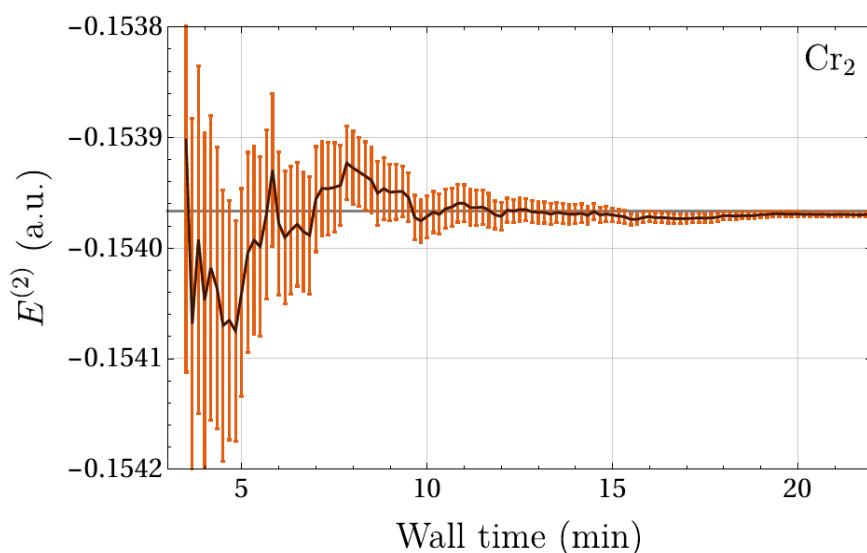


Figure. Convergence of $E^{(2)}$ for the Cr2 molecule with 5 million determinants, cc-pVDZ basis

Mots-clés : quantum many body physics, multireference perturbation theory, Monte Carlo

Références

1 Y. Garniron, A. Scemama, P. F. Loos, and M. Caffarel, *J. Chem. Phys.*, 147, 034101 (2017)

O6. Modeling quantum mechanics by a set of interacting trajectories

L. Cruz-Rodríguez * ^{1,2}, C. Meier¹, LI. Uranga-Piña ² and Aliezer Martínez Mesa ²

¹LCAR, IRSAMC, Université Paul Sabatier, Toulouse, France

²Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba

* lidicecruzr@gmail.com

The solution of the Schrodinger equation for high dimensional systems is one of the major challenges in contemporary physics, with implications in biology and chemistry. In spite of the development of sophisticated wave packet propagation method, the description of the quantum dynamics of systems with more than a few atoms is in general not possible. In this sense, the development of trajectories based methods is an active field of research. Within this context, a very attractive formalism is the hydrodynamic formulation of quantum mechanics where the Schrodinger equation is solved by propagating a bunch of trajectories under the combined action of the quantum and classical force. However, the numerical integration of the hydrodynamic equations is a difficult task.

Here we present some preliminary results of the numerical implementation of an alternative approach recently proposed by Hall and coworkers¹, where the effect of the quantum potential is mimicked by effective pseudo-particle interactions. The method is tested in some one-dimensional model potentials and well-known quantum mechanical effects, such as zero-point energy, tunneling and scattering through potential barriers are captured in good agreement with standard wavepacket propagation methods.

Mots-clés : quantum dynamics, quantum trajectories

Références

1 Hall, Deckert and Wiseman, Phys. Rev. X 4, 041013 (2014)

07. Hybrid parallelization of the Multi-TRRT algorithm: Application to highly-flexible biomolecules

Alejandro Estana*¹, Kevin Molloy¹, Marc Vaisset¹, Nathalie Sibille², Thierry Simeon¹, Pau Bernado² and Juan Cortes¹

¹LAAS-CNRS

²CBS-CNRS

* aestana@laas.fr

TRRT¹ combines ideas of robot motion planning algorithms and methods in statistical physics. It explores the conformational space of molecular system by incrementally growing a search tree that is intrinsically biased towards unexplored regions. A stochastic transition tests favours the exploration of low-energy areas, and it involves a self-additive parameter that helps the exploration to overcome local minima traps. Our first works demonstrated the ability of the exploration to overcome local minima traps. Our first works demonstrated the ability of the method to efficiently find diverse conformational transition pathways for small peptides. Subsequent improvements of the algorithm together with the implementation of a multiple-tree variant allowed us to tackle medium-size peptides². In order to study larger systems, such as intrinsically disordered proteins, we have developed as hybrid parallel implementation of the Multi-T-RRT algorithm³. It combines shared-memory and distributed-memory programming paradigms with the aim of better exploiting the architecture of current computer clusters.

Mots-clés : High Performance Computing (HPC), Hybrid parallelization, Path planning algorithms, Molecular energy landscape exploration

Références

- 1 L. Jaillet, F.J. Corcho, J.J. Perez, J. Cortes, Randomized tree construction algorithm to explore energy landscapes. *Journal of Computational Chemistry*, 32(16):3464-3474 (2011)
- 2 D. Devaurs, K. Molloy, M. Vaisset, A. Shehu, T. Simeon, J. Cortes, Characterizing energy landscapes of peptides using a combination of stochastic algorithms, *IEEE Transactions on NanoBioscience*, 14(5):545-552 (2015)
- 3 A. Estana, M. Vaisset, P. Bernado, J. Cortes, Hybrid parallelization of a multi-tree path search algorithm : Application to highly-flexible biomolecules, Submitted to *Parallel Computing* (2017)

08. Simulation multi-échelle de l'influence de l'irradiation sur les composants électroniques

Antoine Jay^{*1}, Nicolas Richard², Anne Hemeryck³, Layla Martin-Samos⁴, Normand Mousseau⁵, Vincent Goiffon¹, Mélanie Raine²

¹ ISAE, supaero, Toulouse, France,

² CEA-DAM, Bruyère le Châtel, France,

³ CNRS-LAAS, Toulouse, France

⁴ University of Nova Gorica, Slovénie,

⁵ Université de Montréal, Canada,

* antoine.jay@isae.fr

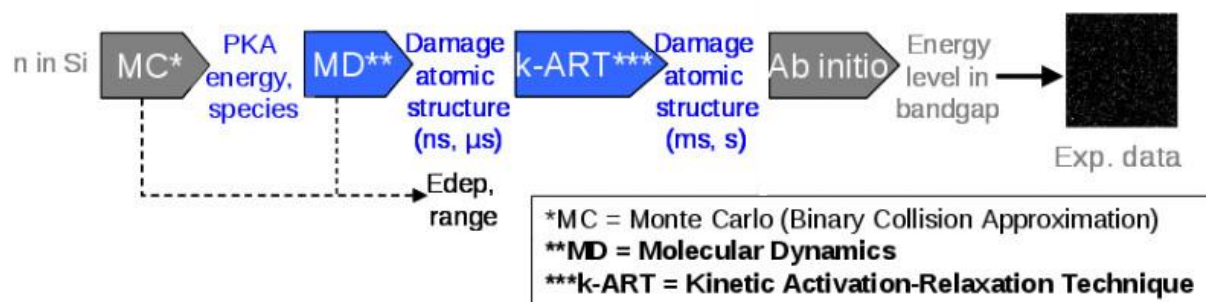


Figure. Projet de simulation global

Les composants irradiés subissent des dommages dans leur structure cristalline qui dégradent leurs propriétés électroniques. En effet, les défauts créés lors de la cascade de collisions possèdent des états électroniques dans le gap qui modifient le taux de génération ou d'absorption du semi-conducteur utilisé. Le projet présenté sur la figure ci-dessus a pour but de modéliser l'ensemble de ce processus depuis la particule incidente responsable de l'irradiation, jusqu'au taux de génération, en passant par la formation de la cascade, la guérison des clusters de défauts, la variation des états métastables, et le calcul des niveaux électroniques. Chaque étape nécessite différentes techniques listées ci-après et peut être vérifiée en comparant avec les observations faites par exemple sur le courant d'obscurité des capteurs d'images CMOS. Le matériau utilisé comme application de ce projet est le silicium.

Mots-clés : ab-initio, états électroniques chargés, approximation GW, NEB, kinetic activation relaxation technique (k-ART), binary collision approximation, dynamique moléculaire, modèle à deux températures, théorie de l'état de transition, théorie SRH.

Références

- 1 M.Raine, and all, IEEE Trans. Nucl. Sc. 64, 133 (2017)
- 2 A. Jay, and all, IEEE Trans. Nucl. Sc. 64, 141 (2017)

09. Diffusion des interstitiels dans les métaux

D. Connétable *¹, M. David¹, D. Monceau¹

¹ CIRIMAT, UMR 5085, CNRS, UPS, INPT, ENSIACET, 4 allée Émile Monso CS 44362, 31030 TOULOUSE Cedex 4

* damien.connetable@ensiacet.fr

De nombreux mécanismes physico-chimiques tels que la ségrégation aux interfaces, les transformations de phases, les processus de fragilisation des alliages métalliques ou encore les cinétiques de dissolution d'éléments se basent sur la connaissance des mécanismes de diffusion des différentes espèces en solution dans le réseau. La connaissance des processus de diffusion des différentes espèces impliquées dans l'oxydation à haute température peut être importante pour comprendre et prédire l'évolution des propriétés mécaniques des super-alliages à base de nickel dans des atmosphères oxydantes. Par exemple, plusieurs observations expérimentales suggèrent que la présence de carbone, d'hydrogène ou encore de lacunes, même en très faible quantité, pourraient modifier de manière significative la perméabilité de l'oxygène dans les systèmes métalliques¹.

Plusieurs études expérimentales ont permis de déterminer les coefficients de diffusion des espèces O²⁻⁵ et H⁶, et références citées] au sein de systèmes métalliques à base de nickel. Mais cette connaissance globale de la diffusion ne permet pas de découpler les différents mécanismes physiques pouvant intervenir à l'échelle atomique.

Nous nous proposons ici de présenter une étude de différents mécanismes de diffusion de l'hydrogène dans les cfc au moyen d'une approche multi-physique. À l'échelle atomique, la DFT est utilisée pour calculer les grandeurs caractéristiques des processus élémentaires (énergies de migration et fréquences de saut), et un modèle analytique du coefficient de diffusion sera proposé en fonction des différentes configurations obtenues. Enfin nous aborderons l'effet des amas constitués d'une lacune et d'un élément interstitiel sur la diffusion de la lacune et de l'hydrogène.

Mots-clés : DFT, métallurgie, diffusion, interstitiels

Références :

- 1 S. Pérusin. Experimental Study of the Interactions Between Oxidation and Structural Defects. Materials Science Forum, 461 :123-130, 2004
- 2 Jong-Wan Park and Carl J Altstetter. The diffusion and solubility of oxygen in solid nickel. Metallurgical Transactions A, 18(1) :43-50, 1987
- 3 G. J. Lloyd and J W Martin. The Diffusivity of Oxygen in Nickel Determined by Internal Oxidation of Dilute Ni-Be Alloys. Metal Science Journal, 6 :7-11, 1972
- 4 Shoji Goto, Koji Nomaki, and Sigeyasu Koda. Internal oxidation of nickel alloys containing a small amount of chromium. JAP INST METALS J, 31(4) :600-606, 1967
- 5 R Barlow and P. J. Grundy. The Determination of the Diffusion Constants of Oxygen in Nickel and alpha-iron by an Internal Oxidation Method. Journal of Materials Science, 4 :797-801, 1969
- 6 H Vehoff. Diffusion of hydrogen in metals. Hydrogen in Metals III, 73 :51-91, 1997

O10. Importance d'un traitement purement quantique des propriétés de fractionnement isotopique à l'équilibre des espèces ioniques dissoutes : le cas de $\text{Li}^+(\text{aq})$

Romain Dupuis ¹, Magali Benoît ², Mark Tuckerman ³, and Merlin Méheut * ⁴

¹ Donostia International Physics Center (DIPC) – Paseo Manuel de Lardizabal, 4. 20018 SAN SEBASTIAN, Spain

² Centre d'élaboration de Matériaux et d'Etudes Structurales (CEMES) – 29 rue Jeanne Marvig, Toulouse

³ New York University (NYU) – United States

⁴ Géosciences Environnement Toulouse (GET) – OMP, UPS, 14 avenue Edouard Belin, Toulouse

* merlin.meheut@get.omp.eu

Le fractionnement à l'équilibre des isotopes stables trouve des applications aussi bien en chimie, que ce soit la chimie médicale, l'électrochimie, la géochimie, que dans les sciences environnementales. Le manque d'estimations fiables du fractionnement à l'équilibre, venant d'approches expérimentales ou de mesures naturelles, entraîne un besoin pour des approches théoriques précises. Parce que le fractionnement isotopique est un phénomène purement quantique, son calcul exact n'est pas un problème trivial. C'est pourquoi une approximation drastique est souvent faite, dans laquelle on suppose que le système peut se décomposer en une série d'oscillateurs harmoniques indépendants.

Une catégorie de problèmes pour laquelle on peut s'attendre à ce que l'approximation harmonique soit particulièrement déficiente est le fractionnement isotopique entre un solide et une solution. Dans le but d'illustrer les erreurs entraînées par l'approximation harmonique, nous avons considéré le fractionnement des isotopes du Li entre une solution aqueuse et des minéraux de type phyllosilicate, et nous trouvons que l'approximation harmonique surestime le facteur de fractionnement isotopique de 30% à 25°C.

Dépasser l'approximation harmonique nécessite un calcul exact des propriétés quantiques, qui peut être réalisé à partir de la formulation de Feynman de la mécanique statistique quantique en termes d'intégrales de chemin. Dans l'approche par intégrales de chemin, un système de particules quantiques est représenté par des chaînes polymères bouclées simili-classiques, dont les interactions internes sont déterminées par les règles de la mécanique quantique. Parce qu'un isomorphisme classique existe entre le vrai système quantique et le système de polymères bouclés, des méthodes simili-classiques peuvent être utilisées.

Des développements récents pour une application numériquement efficace des approches par intégrales de chemin permettent désormais d'étudier le cas du Li en solution en détails.

Nous trouvons que ces calculs donnent un résultat en bon accord aussi bien avec les données expérimentales qu'avec les observations naturelles. En particulier, les méthodes par intégrales de chemin, qui sont intégralement au niveau atomique, permettent d'identifier l'origine des effets anharmoniques et de faire des prédictions fiables à des températures inaccessibles expérimentalement, bien que pertinentes pour les phénomènes naturels.

Mots-clés : Isotope fractionation

Références

1 R. Dupuis, M. Benoît, M. Tuckerman, M. Méheut *Accounts of Chemical Research* 50, 1597 (2017)

O11. Fractionnement isotopique du zinc entre minéral et solution par calcul DFTMarc Blanchard *¹, Manoj Ducher ², Fabio Pietrucci ², Guillaume Ferlat ², Etienne Balan ²¹ GET, CNRS, Université Paul Sabatier, Toulouse² IMPMC, Sorbonne Universités, Paris

* marc.blanchard@get.omp.eu

Le cycle biogéochimique du zinc possède d'importantes implications économiques, environnementales et de santé publique. La moitié du zinc extrait est rejeté vers les sols qui représentent le plus grand réservoir de cet élément après le manteau et la croûte terrestre. Une fois dans les sols, le zinc est mobilisé vers les eaux douces puis les océans. Le zinc est un nutriment essentiel pour les organismes vivants mais déficit et excès de zinc sont nocifs. L'exploration des compositions isotopiques représente une manière efficace de tracer les sources et les processus physico-chimiques impliquant cet élément. Toutefois, l'interprétation de ces mesures requiert la connaissance des propriétés isotopiques du zinc en condition d'équilibre (qui servent de référence) et la compréhension des mécanismes à l'origine des variations de la composition isotopique.

Dans ce travail, nous avons déterminé en réalisant des calculs quantiques (calculs statiques, dynamiques moléculaires et métadynamiques), les constantes d'équilibre d'échange isotopique du zinc dans des phases solides (minéraux) et liquides (zinc aqueux). Nous avons identifié les paramètres cristalochimiques contrôlant les propriétés isotopiques : la constante de force interatomique du zinc, les longueurs de liaisons Zn-premiers voisins et la charge électronique de ces premiers voisins ¹. Nous avons montré à travers la modélisation du zinc aqueux, qu'une description raisonnable des forces de van der Waals par une fonctionnelle d'échange et de corrélation non locale est nécessaire à la stabilisation à conditions ambiantes du complexe hexaaquo zinc par rapport à d'autres complexes, réconciliant ainsi calculs et expériences ². Ce travail met à disposition des études expérimentales une base de données cohérente de constantes d'équilibres isotopiques entre minéraux et zinc aqueux.

Mots-clés : zinc, isotopes, DFT, géochimie**Références :**1 M. Ducher, M. Blanchard, E. Balan, *Chemical Geology* 443, 87 (2016)2 M. Ducher, F. Pietrucci, E. Balan, G. Ferlat, L. Paulatto, M. Blanchard, *Journal of Chemical Theory and Computation* 13(7), 3340 (2017)

O12. Étudier la dynamique et le confinement des ions dans les supercondensateurs par des simulations

Céline Merlet * ^{1,2}

¹ CIRIMAT, Université de Toulouse, CNRS, INPT, UPS, Université Toulouse 3 Paul Sabatier, Bât. CIRIMAT 118, route de Narbonne, 31062 Toulouse Cedex 9

² Réseau sur le Stockage Electrochimique de l'Énergie (RS2E), FR3459, 33 rue St Leu, 80039 Amiens

* merlet@chimie.ups-tlse.fr

Les progrès dans le développement de nouveaux systèmes de stockage d'énergie sont limités par notre manque de compréhension des phénomènes microscopiques qui déterminent les performances électrochimiques de ces systèmes. Dans cette présentation, je montrerai comment des simulations de dynamique moléculaire ont permis d'explorer l'interface électrode-électrolyte dans les supercondensateurs carbone-carbone et d'expliquer la forte augmentation de capacité observée dans les électrodes faites de carbone poreux¹. Je présenterai ensuite les modèles sur réseaux que je développe pour faire le lien entre les simulations moléculaires et les expériences. Ces modèles, versatiles et très efficaces numériquement, me permettent d'atteindre les échelles de temps et d'espace expérimentaux et de prédire des grandeurs intéressantes telles que des quantités d'ions adsorbés, des spectres RMN ou des tortuosités^{2,3}.

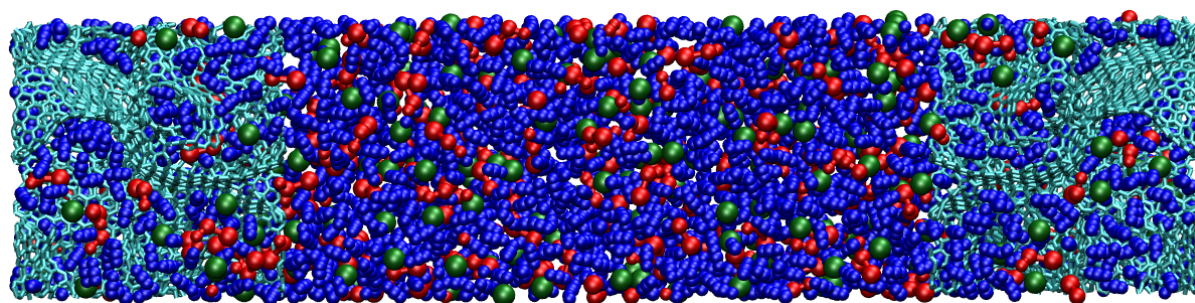


Figure. Supercondensateur modèle étudié par dynamique moléculaire classique (cations en rouge, anions en vert, solvant en bleu foncé, électrodes de carbone poreux en bleu clair).

Mots-clés : Supercondensateur, dynamique moléculaire classique, modèles mésoscopiques, adsorption.

Références

1 C. Merlet, B. Rotenberg, P. A. Madden, P.-L. Taberna, P. Simon, Y. Gogotsi, and M. Salanne, *Nature Mater.*, 11, 306 (2012)

2 C. Merlet, A. C. Forse, J. M. Griffin, D. Frenkel and C. P. Grey, *J. Chem. Phys.*, 142, 094701 (2015)

3 A. C. Forse, C. Merlet, P. K. Allan, E. K. Humphreys, J. M. Griffin, M. Aslan, M. Zeiger, V. Presser, Y. Gogotsi and C. P. Grey, *Chem. Mater.*, 27, 6848 (2015)

013. Modélisation de systèmes membranaires par modélisation Gros-Grains : de l'échelle nano à la dimension meso

Matthieu Chavent *¹

¹ IPBS, UMR 5089, Université Paul Sabatier, 205 Route de Narbonne, 31077 Toulouse cedex 4

* matthieu.chavent@ipbs.fr

La modélisation par dynamique moléculaire gros grains est de plus en plus utilisée pour décrire les interactions entre protéines et lipides à une résolution proche atomique mais également pour représenter des systèmes membranaires de plus en plus complexes¹. Après une brève description du modèle Gros Grains MARTINI², je présenterai divers cas d'étude : d'abord un système très simple constitués de deux hélices alpha au sein d'une membrane³ puis un récepteur tyrosine kinase (EphA) traversant la membrane et pouvant interagir de manière différente avec celle-ci en fonction de sa composition^{4,6}. Enfin, je terminerai cette série d'exemples par la modélisation d'un très grand morceau de membrane bactérienne composé de plusieurs dizaines à plusieurs centaines de protéines^{6,7}. Je conclurai en détaillant les limitations de ce type de modélisation, en particulier au niveau meso (proche du micromètre), et comment nous essayons de les dépasser avec des modèles simplifiés paramétrés grâce aux modèles Gros-Grains.

Mots-clés : Dynamique Moléculaire, modélisation multi-échelle, Gros-Grains, systèmes membranaires, interactions protéine-lipides.

Références

- 1 M. Chavent, A. L. Duncan, M. S. P. Sansom, *Current Opinion in Structural Biology*, 8-16 (2016)
- 2 S. J. Marrink, H. J. Risselada, S. Yefimov, D. P. Tieleman, A. H. de Vries, *J. Phys. Chem B*, 7812-7824 (2007)
- 3 M. Chavent, A. P. Chetwynd, P. J. Stansfeld, M. S. P. Sansom, *Biochemistry*, 6641-6652 (2014)
- 4 M. Chavent, E. Seiradake, E. Y. Jones, M. S.P. Sansom, *Structure*, 1-11 (2016)
- 5 M. Chavent, D. Karia, A. C. Kalli, J. Domanski, A. L. Duncan, G. Hedger, P. J. Stansfeld, E. Seiradake, E. Y. Jones, M. S. P. Sansom, (En préparation)
- 6 P. Rassam, N. A. Copeland, O. Birkholz, C. Toth, M. Chavent, A. L. Duncan, S. J. Cross, N. G. Housden, R. Kaminska, U. Seger, D. M. Quinn, T. J. Garrod, M. S. P. Sansom, J. Piehler, C. G. Baumann, C. Kleanthous, *Nature*, 333-336 (2015)
- 7 M. Chavent, A. Duncan, P. Rassam, O. Birkholz, J. Helie, T. Reddy, D. Belaeyv, B. Hambly, J. Piehler, C. Kleanthous, M. S. P. Sansom, (soumis)

O14. Distribution de l'eau dans le site catalytique des oncoprotéines NRas

Ruth Tichauer*¹, Georges Landa¹, Anne Hémerlyck¹, Marie Brut¹

¹ LAAS-CNRS, Université de Toulouse, CNRS, UPS, Toulouse, France

* rhtichau@laas.fr

Ras est une protéine jouant un rôle majeur dans la régulation de la croissance cellulaire¹. Elle prend alternativement deux configurations : i) l'une quand elle est liée au GTP, favorisant des interactions avec des effecteurs et activant ainsi les signaux de croissance cellulaire, ii) l'autre, quand elle est liée au GDP, qui la rend inactive. Le passage entre ces deux configurations s'opère lors de l'hydrolyse du GTP dont Ras est un catalyseur. Des mutations spécifiques, notamment celle de la Glutamine 61, sont la signature de tumeurs à mauvais pronostics. Ces mutations entraînent une diminution drastique du taux d'hydrolyse, laissant ainsi Ras dans une configuration hyperactive qui engendre alors une prolifération des cellules tumorales². Afin de comprendre les mécanismes d'hydrolyse du GTP au sein de Ras, et donc de comprendre en quoi certaines mutations perturbent son fonctionnement, nous avons mené l'étude théorique de la forme native et de différents mutants en faisant des simulations de dynamique moléculaire avec des potentiels hybrides QM/MM. Nous présenterons les principaux résultats de cette étude.

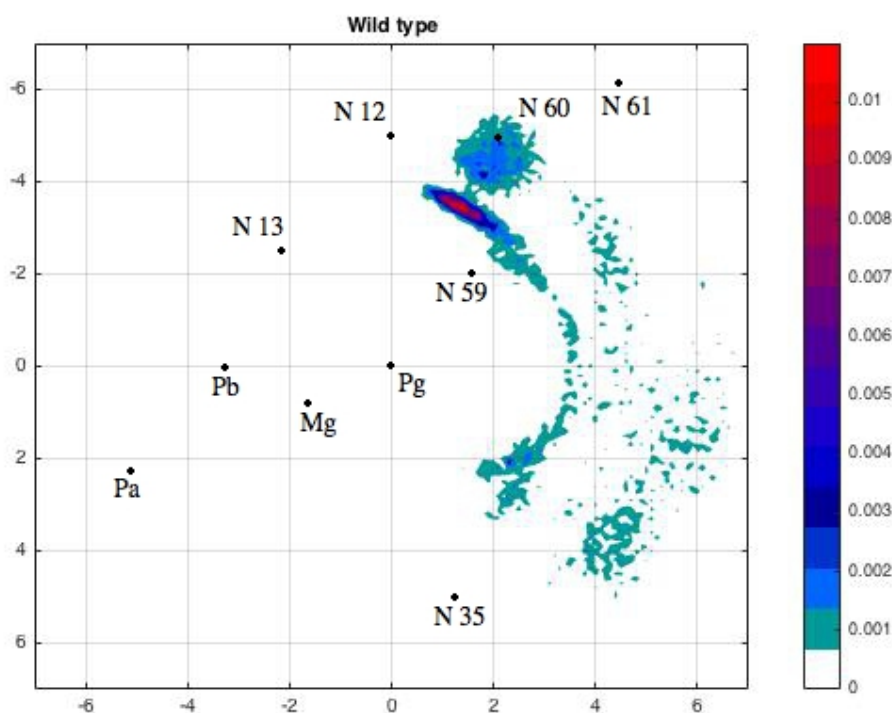


Figure. Distribution surfacique du solvant dans le site actif

Mots-clés : oncoprotéine Ras, GTPase, Dynamique Moléculaire, QM/MM

Références

1 HR. Bourne, DA. Sanders, F. McCormick, Nature 349, 117-127 (1991)

2 A. Wittnghofer, H. Waldmann, Angewandte Chemie International Edition 39, 4192-4214 (2000)

O15. Modeling of Interaction between the Focal Adhesion Kinase (FAK) and Protein Kinase C theta (PKC θ)

Georges Czapllicki *¹, Karine Belguise², Xiaobo Wang²

¹ Institut de Pharmacologie et de Biologie Structurale-CNRS, Université de Toulouse, 205 route de Narbonne, 31077 Toulouse, France

² LBCMCP, Centre de Biologie Intégrative (CBI), Université de Toulouse, CNRS, UPS, 31062 Toulouse, France

* cgeorge@ipbs.fr

Triple-negative breast cancer (TNBC) is a subtype of breast cancers that is clinically negative for the expression of estrogen receptor (ER), progesterone receptor (PR) and HER2 protein. TNBC features a more aggressive tumoral phenotype and a higher risk of recurrence than other subtypes. Currently, there is no efficient targeted therapy that can prevent the metastatic dissemination of TNBC. A better understanding of the mechanism(s) responsible for the invasive properties of TNBC is critical in order to develop more effective treatments.

PKC θ has been identified as a potential new marker, as this protein and its mRNA levels are strongly expressed in TNBC cell lines. PKC θ is a serine/threonine kinase which controls the tumor invasion of TNBC by affecting cell-extracellular matrix interaction as well as cell-cell interaction, leading to change in cell shape and cell cohesion. It activates the Focal Adhesion Kinase (FAK) signaling, known to regulate the cellular invasion by modulating the dynamics of the interaction between cells at the sites of focal adhesion. FAK is necessary for the PKC θ -induced invasion. We determined the molecular mechanism by which PKC θ regulates FAK pathways through PKC θ -FAK interaction and identified by mass spectrometry the PKC θ phosphorylation sites on the FAK protein.

To gain a better understanding of the details of the interaction between the two molecules, molecular modeling of the FAK-PKC θ complex has been attempted. The partial structure of FAK, containing the FERM and Kinase domains, is known from crystallographic studies. Its stability has been confirmed by a 1 μ s run of a coarse-grained molecular dynamics (CG-MD) simulation. The PKC θ molecule consists of the C2, C1, V3 and Kinase domains, whose individual structures have been determined experimentally, with the exception of V3, which has been modeled by homology. In this work we used the experimental data on complex formation to determine the optimal relative orientation of the PKC θ domains with respect to the FAK molecule. A forthcoming article will contain all details of the procedure¹.

Mots-clés : cancer research, molecular modeling, simulation of molecular dynamics

Références

1 L. Chadelle, V. Cadamuro, J. Liu, S. Gandarillas, C. Froment, F. Capilla, C. Segura, L. Van Den Berrghe, T. Al Saatti, O. Schiltz, Y. Barreira, D. Chalbos, G. Czapllicki, K. Hahn, X. Wang, K. Belguise, article in preparation.

O16. Molecular alignment of CH₃I-⁴He

Patricia Vindel-Zandbergen¹, Ji Jiang², Manuel Barranco³, Marius Lewerenz², Christoph Meier¹, Martí Pi³, Nadine Halberstadt¹

¹ *Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité, Université Paul Sabatier, 118 route de Narbonne 31062 Toulouse Cedex 09, France*

² *Laboratoire de Modélisation et Simulation Multi Echelle, Equipe de Chimie Théorique, 5 Boulevard Des-cartes 77454 Marne-la Vallée Cedex 2, France*

³ *Departament FQA, Facultat de Física, and IN2UB, Universitat de Barcelona, Diagonal 645, 08028 Barcelona, Spain*

* patricia.vindel@irsamc.ups-tlse.fr

The alignment of molecular species by strong non-resonant laser fields has been widely used within the last decade and has proven to be very useful in many applications in molecular science. For a detailed review of this methodology and its applications, see e.g.¹ and references therein. After the strong pulse interaction leading to alignment, the subsequent dynamics is then given by the time evolution of the free rotor states, which for short times typically shows a strong dephasing, leading to an almost isotropic orientational distribution. However, for an isolated system, due to the discreteness of the spectrum, and the finite number of excited rotational states involved, the rotational wave packet rephases at well-defined later times, leading to the same aligned state as at the initial time (rotational revivals). This method has the advantage of providing a field free alignment of molecules at these times.

The phenomena of revivals depends crucially on the coherent evolution of the rotational wave packet, and as such forms a sensitive tool to study the interaction with a weakly interacting environment. In this perspective, the method of adiabatic alignment within a helium droplet offers an extremely interesting aspect: to which extent can a superfluid helium environment lead to decoherence of the rotational states? This question has recently been addressed experimentally, and as surprising result, they found the rotational dynamics much slower than that of isolated molecular species and the absence of the rotational revivals characteristic of gas phase molecules^{2,3,4}. In order to shine light on this process, we perform numerical simulations of the adiabatic laser alignment of CH₃I within the helium droplet.

As a first step, we analyze the CH₃I molecule with a single helium atom. To describe the intermolecular interaction, we use a potential composed of a sum over CH₃-He and I-He terms obtained by fitting to ab initio calculations. These potentials are then used for quantum dynamical propagations, including the laser pulses chosen according to the above cited experiments, to model the adiabatic alignment, and its modification due to the presence of a single helium atom. Based on this full quantum mechanical wave packet describing the rotor dynamics together with the motion of the helium, we analyze the rotational decoherence by tracing out the degrees of freedom of the helium, and we directly model the observed alignment signal, to compare with the experiments presented in Ref. 2. As an outlook, on the basis of this work, we discuss the possibility to model the molecular alignment within superfluid helium droplets within the framework of density functional theory, such as used by the Barcelona group⁵.

Mots-clés : molecular alignment, He nanodroplets, rotational dynamics, molecules in laser fields

Références

1 H. Stapelfeldt and T. Seideman 2003 Rev. Mod. Phys. 75 543-557

2 D. Pentlehner, J.H. Nielsen, A. Slenczka, K. Mølmer and H. Stapelfeldt 2013 Phys. Rev. Lett. 110 093002

3 D. Pentlehner, J.H. Nielsen, L. Christiansen, A. Slenczka and H. Stapelfeldt 2013 Phys. Rev. A 87 063401

4 L. Christiansen, J.H. Nielsen, D. Pentlehner, J.G. Underwood and H. Stapelfeldt 2015 Phys. Rev. A 92 053415

5 M. Barranco et al. 2006 J. Low Temp. Phys. 142 1

017. Méthodes CASSCF, RASSCF et GASSCF

Nadia Ben Amor * ¹

¹ *Laboratoire de Chimie et Physique Quantique, IRSAMC, Université Paul Sabatier, Toulouse*

* *benamor@irsamc.ups-tlse.fr*

Il est parfois nécessaire de trouver un compromis entre la complexité des problèmes multiréférentiels et les grandes dimensions des systèmes, sans que cela soit au prix de la précision des calculs. Le problème qui se pose est celui de la définition d'un espace actif, que ce soit pour l'optimisation des orbitales ou pour la prise en compte de la corrélation électronique dynamique. La méthode CASSCF¹ (Complete Active Space) a été initialement pensée pour inclure toute la valence ce qui limiterait la méthode à l'étude de petits systèmes. En réalité, la prise en compte dans l'espace actif des électrons et orbitales impliqués dans les différents états recherchés est généralement suffisante. A l'intérieur de cet espace actif, tous les déterminants qu'il est possible de former avec ces électrons et ces orbitales identifiés sont générés, ce qui limite rapidement les possibilités. En effet, il est difficilement envisageable d'aller au-delà de 16 électrons dans 16 orbitales. Le RASSCF¹ et le GASSCF² (respectivement Restricted et Generalized Active Space) de MOLCAS ainsi que la méthode ORMAS³ (Occupation Restricted Multiple Active Space) implémentée dans GAMESS sont des variantes du CASSCF permettant de réduire le nombre d'excitations en séparant l'espace actif en sous-espaces. Cela permet de réduire de façon très spectaculaire la taille des calculs. Ces méthodes seront présentées et illustrées sur le système N-acetyl-phenylalaninyl-amide.

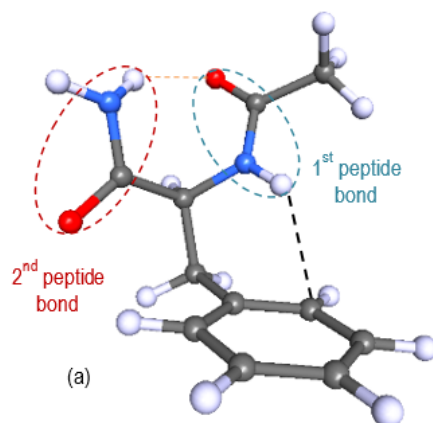


Figure. N-acetyl-phenylalaninyl-amide

Mots-clés : méthodes, CASSCF, RASSCF, GASSCF

Références

- 1 B.O. Roos, P.R. Taylor, and P.E.M. Siegbahn, *Chem. Phys.* 48, 157 (1980)
- 2 D. Ma, G. Li Manni, and L. Gagliardi, *J. Chem. Phys.* 135, 044128 (2011)
- 3 J. Ivanic, *J. Chem. Phys.* 119, 9364 (2003)

O18. Implémentation et calculs de spectres IR et Raman au-delà de l'approximation harmonique pour les systèmes périodiques (polymère, surface, cristal)

Philippe Carbonnière*¹, Michel Rérat ¹

¹IPREM/ECP, Technopole d'Hélioparc, 2 avenue P. Angot, 64053 Pau Cedex 9

* philippe.carbonniere@univ-pau.fr

Cette communication est dédiée au calcul de spectres vibrationnels anharmoniques pour les systèmes périodiques tel qu'implémentés récemment dans le code CRYSTAL.

Les méthodes de traitement anharmonique correspondent à celles qui ont été développées au niveau moléculaire. Plus particulièrement il sera question :

- De la construction d'un champ de force anharmonique correspondant à une maille ou une super-cellule au voisinage d'une position d'équilibre, via la détermination des dérivées successives de l'énergie par rapport aux déplacements atomiques dans la maille.
- Du traitement vibrationnel anharmonique (mécanique) du système par la méthode d'interaction de configurations vibrationnelles (VCI) menée soit dans une base d'oscillateurs harmoniques (VCI-HO) soit dans une base obtenue préalablement par une méthode de champ auto-cohérent (VCI-VSCF).
- Du calcul des intensités vibrationnelles IR et Raman dans le cadre de l'anharmonicité mécanique.

Concernant le dernier point il sera également rappelé la méthode CPKS¹ (Coupled-Perturbed Kohn Sham), également implémentée dans le code, qui permet de calculer les propriétés de réponse à un champ électrique et/ou mécanique conduisant à la détermination des grandeurs macroscopiques suivantes : constantes diélectriques - indices de réfraction ; susceptibilité électrique - effet Pockels - génération de seconde harmonique ; piézoélectricité² ; élasticité ; intensités harmoniques IR et Raman.

Dans un cadre plus appliqué, il sera illustré l'exemple du calcul anharmonique de spectres vibrationnels correspondant à différents défauts dans le diamant³.

Mots-clés : spectres anharmoniques, IR, Raman, systèmes périodiques

Références

- 1 M. Ferrero, M. Rerat, R. Orlando, R. Dovesi, I. J. Bush, J. Phys : conference series 117 012016 (2008)
- 2 K.E. EL-Kelany, P. Carbonniere, A. Erba, J.M. Sotiropoulos, M. Rerat, J. Phys. Chem. C 120 7795 (2016)
- 3 F. S. Gentile, S. Salustro, M. Causa, A. Erba, P. Carbonniere, R. Dovesi, Phys. Chem. Chem. Phys. 19 22221 (2017)

O19. Second-order difference density matrices for effective orbital relaxation - Topological insights

Mariachiara Pastore^{1,2}, Antonio Monari^{1,2}, Xavier Assfeld^{1,2}, Thibaud Etienne³

¹ Université de Lorraine – Nancy, France (Théorie-Modélisation-Simulation SRSMC)

² CNRS (Théorie-Modélisation-Simulation SRSMC) – CNRS : UMR7565

³ Chimie Théorique, Méthodologies, Modélisation – Institut Charles Gerhardt, Université de Montpellier, France

* thibaud.etienne@umontpellier.fr

Providing a quantitative insight into light-induced electronic structure reorganization of complex chromophores remains a challenging task that has attracted a substantial attention from theoretical communities in the past few years. Indeed, a potential knowledge related to the ability of a chromophore to undergo a charge transfer caused by photon absorption or emission is of seminal importance for designing novel dyes with highly competitive optoelectronic properties. These target systems are at the center of the main societal issues of our time such as public health with anti-cancer phototherapy, sustainable energy with high-performance solar cells, or homeland security with explosive probes for example. In this context, we elaborated systematic and tractable strategies for qualitatively and quantitatively assessing the electronic cloud polarization of complex molecular structures upon a transition to or from electronic excited states, and improve our understanding of the electronic transition process¹⁻³. In addition to providing a clear picture of complex charge transfer processes, our topological metrics are able to act as reliable diagnostic instruments for the exchange-correlation functionals used within the time-dependent density functional theory framework, and therefore constitute a precious tool for computational chemists, though they are not restricted to density-based methods. After introducing the theoretical elaboration of our strategy and applying it to the aforementioned hot topics, this contribution will detail for the generalization of our topological analyses to fully relaxed excited states density matrices including the so-called Z-vector. Finally, the way our developments allowed us to unravel the physical nature of Handy's Z-vector itself⁴ will be reported.

Mots-clés: Excited states, charge transfer, topology, Z-vector, quantum metrics

Références

- 1 T. Etienne, X. Assfeld, A. Monari, J. Chem. Theory Comput. 10, 3896 & 3906 (2014)
- 2 T. Etienne, J. Chem. Theory Comput. 11, 1692 (2015)
- 3 T. Etienne, J. Chem. Phys. 142, 244103 (2015)
- 4 M. Pastore, A. Monari, E. Mosconi, X. Assfeld, T. Etienne, J. Chem. Phys. 147, 042108 (2017)

O20. La méthode 'Nudged Elastic Band' : un outil puissant en photochimie théorique

Isabelle M. Dixon ^{*1}, Adrien Soupart¹, Fabienne Alary¹, Jean-Louis Heully¹

¹ Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques, UMR 5626 CNRS/Université Paul Sabatier, Toulouse

* isabelle.dixon@irsamc.ups-tlse.fr

Depuis plus de cinquante ans, les complexes $[\text{Ru}(\text{bpy})_3]^{2+}$ et $[\text{Ru}(\text{tpy})_2]^{2+}$ sont incontournables en photochimie inorganique. Il est possible de construire un diagramme de Jablonski grâce à l'optimisation par DFT des états triplets $^3\text{MLCT}$ (Metal-to-Ligand Charge Transfer) et ^3MC (Metal Centred) mais ce diagramme se révèle insuffisant pour expliquer les propriétés photophysiques de ces deux complexes. En effet, leurs diagrammes sont très comparables et pourtant, $[\text{Ru}(\text{bpy})_3]^{2+}$ est luminescent à température ambiante alors que $[\text{Ru}(\text{tpy})_2]^{2+}$ ne l'est pas. C'est pourquoi il est capital d'aller au-delà en sondant la topologie de la surface d'énergie potentielle triplet (^3SEP) ^{1,2}.

Nous présenterons comment nous pouvons rationaliser les propriétés photophysiques de ces complexes (Figure ci-dessous) en combinant (i) le calcul du chemin d'énergie minimum associé à la conversion $^3\text{MLCT}$ - ^3MC en utilisant, pour la première fois dans les états excités, la méthode Nudged Elastic Band (NEB) ³ et (ii) la localisation du point de croisement d'énergie minimum (MECP) connectant les SEP excitée et fondamentale, voie cruciale à la désactivation non radiative du système ⁴.

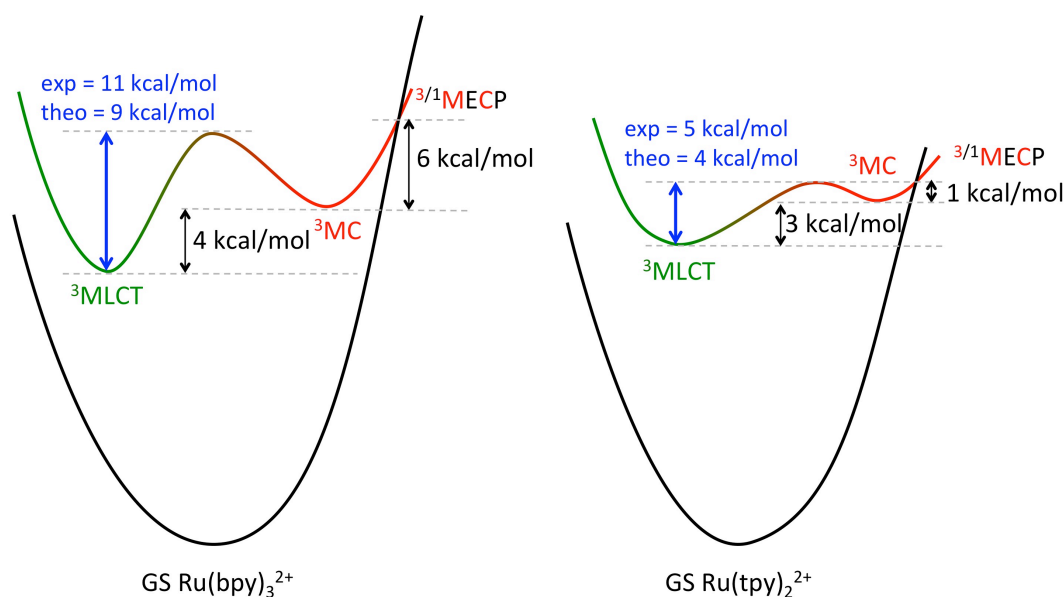


Figure. Surfaces d'énergie potentielle calculées par DFT

Mots-clés : DFT – photophysique – ruthénium – chemin d'énergie minimum – barrière d'énergie

Références

- 1 O. A. Borg, S. S. M. C. Godinho, M. J. Lundqvist, S. Lunell, P. Persson, J. Phys. Chem. A 112, 4470 (2008); T. Osterman, A. Abrahamsson, H.-C. Becker, L. Hammarström, P. Persson, J. Phys. Chem. A, 116, 1041 (2012)
- 2 A. Breivogel, M. Meister, C. Förster, F. Laquai, K. Heinze, Chem. Eur. J. 19, 13745 (2013).
- 3 G. Henkelman, H. Jonsson, J. Chem. Phys. 113, 9978 (2000)
- 4 A. Soupart, I. M. Dixon, F. Alary, J.-L. Heully, soumis pour publication

O21. Propriétés structurales et photophysiques du 3-hexylthiophène (P3HT) : études expérimentale et théorique combinées

Léa Farouil^{*1,2}, Fabienne Alary¹, Elena Bedel-Pereira², Isabelle Seguy², Jean-Louis Heully¹

¹ LCPQ-IRSAMC, Université de Toulouse, 118 route de Narbonne, 31062 Toulouse, France

² LAAS-CNRS, Université de Toulouse, CNRS, 7 avenue du Colonel Roche, 31400 Toulouse, France

* lea.farouil@irsamc.ups-tlse.fr

L'objectif de ce travail est la mise au point d'une photodiode organique (OPD) intégrée dans un microsystème de détection basé sur les propriétés de luminescence d'une micro-algue. L'OPD est élaborée à partir d'un polymère à faible gap, le PTB7 (efficacité quantique extérieure élevée de 80% lorsqu'il est, associé au PC₇₁BM)¹. L'optimisation de l'OPD passe par la compréhension théorique des propriétés photophysiques des composés. Aussi, un protocole utilisant des calculs TD-DFT et DFT a été mis au point en s'appuyant sur le P3HT, composé très étudié dans la littérature. Les spectres Raman, infrarouge, d'absorption UV-visible résolu en vibrations (Figure ci-dessous) et de photoluminescence (PL) simulés présentent un très bon accord avec les spectres expérimentaux, validant la méthode utilisée. Par ailleurs, nous démontrons que la structure vibronique est due à un mode collectif dominé par l'élongation des liaisons C-C inter-cycles et intra-cycles et couplée au mode de vibration des chaînes alkyle. En optimisant et en décrivant les états excités les plus bas de ces oligothiophènes (états singulet S1 et triplet T1), nous montrons également que S1 et T1 présentent une structure quinoïdale avec une distribution de spin localisée sur la partie centrale de la chaîne. Les énergies relatives des deux états excités les plus bas offrent la possibilité à ces systèmes d'être impliqués dans le processus de fission d'excitons de singulet. Ayant démontré que les méthodes ab-initio modernes sont capables de décrire avec de bonnes précisions les propriétés vibrationnelles et optoélectroniques des chaînes de polymères et, d'estimer l'impact de la longueur de chaîne des oligomères, nos efforts théoriques actuels sont axés sur l'étude des propriétés du polymère pour notre photodiode, le PTB7.

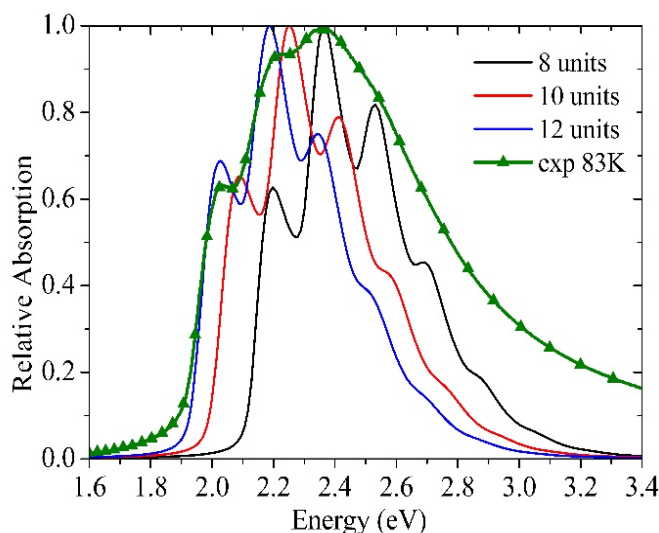


Figure. Spectres d'absorption expérimental et théorique résolu en vibration à 83K du rr-P3HT

Mots-clés : semiconducteurs organiques, spectroscopies d'absorption UV-Vis, Raman et de photoluminescence, modélisation

Références

1 C. M. Lochner, Y. Khan, A. Pierre and A. C. Arias, Nature communications, 1-7(2014)

P1. Computational Protein Design to accelerate the conception of fine-tuned biomolecules

Simoncini David¹, Clément Viricel¹, Antoine Charpentier¹, Seydou Traoré¹, Simon de Givry², Kam Y.J. Zhang³, David Mignon⁴, Thomas Simonson⁴, Juan Cortés⁵, Isabelle André¹, David Allouche², Thomas Schiex² and Sophie Barbe^{1*}

¹ Laboratoire d'Ingénierie des Systèmes Biologiques et des Procédés, INRA, CNRS, INSA, Toulouse, France

² Unité de Mathématiques et Informatique Appliquées de Toulouse, INRA, Auzeville-Tolosane, France

³ Center for life Science Technologies, Division of Structural and Synthetic Biology, RIKEN, Japan

⁴ Biology Department, Biochemistry Laboratory, Ecole Polytechnique, Palaiseau, France

⁵ Laboratoire d'Analyse et d'Architecture des Systèmes, CNRS, Toulouse, France

* Sophie.Barbe@insa-toulouse.fr

The remarkable properties of enzymes (high catalytic efficiency, regio- and stereo-selectivity) have been recognized and largely exploited in biocatalysis. Accordingly, enzyme-driven processes should play an increasing role in the next decades, potentially substituting chemical processes and contributing to the raise of bioeconomy. However, to foresee a viable future to biocatalysis, advances in R&D are required to accelerate the delivery of fine-tuned enzymes displaying high chemical specificity on non-cognate substrates, high efficiency and better stability in reaction conditions. To this end, structure-based Computational Protein Design (CPD) is a promising strategy to fully rationalize and speed-up the conception of new enzymes while reducing associated human and financial costs.

By combining physico-chemical models governing relations between protein amino-acid composition and their 3D structure with optimization algorithms, CPD seeks to identify sequences that fold into a given 3D-scaffold and possess the targeted biochemical properties. Starting from a huge search space, the protein sequence-conformation space, this *in silico* pre-screening aims to considerably narrow down the number of mutants tested at experimental level while substantially increasing the chances of reaching the desired enzyme. While CPD is still a very young and rapidly evolving field, success stories of computationally designed proteins highlight future prospects of this field. Nonetheless, despite landmark achievements, the success rate of the current computational approaches remains low, and designed enzymes are often way less efficient than their natural counterparts. Therefore, several limitations of the CPD still need to be addressed to improve its efficiency, predictability and reliability.

Herein, we present our methodological advances in the CPD field that enabled overcoming technological bottlenecks and hence propose innovative CPD methods to explore large sequence-conformation spaces while providing more accuracy and robustness than classical approaches. Our CPD methods speed-up search across vast sequence-conformation spaces by several orders of magnitude, find the minimum energy enzyme design and generate exhaustive lists of near-optimal sequences, defining small mutant libraries. These new methods, in rupture with classical approaches are based on efficient algorithms issued from recent research in artificial intelligence. The performance and accuracy of our computer-aided protein design methods have been evaluated and validated on various types of protein design problems.

This work was partially funded by INRA/Région Midi-Pyrénées, IDEX Toulouse, Agreenskills and the French National Research Agency (PROTICAD, ANR-12-MONU-0015-03).

Mots-clés : Computational protein design, *In silico* rational enzyme engineering, Artificial Intelligence, Combinatorial optimization algorithms, Large protein sequence-conformation search space.

P2. Computational study and prediction of enzyme-carbohydrate interactions to assist the development of novel chemo-enzymatic routes towards O-antigenic oligosaccharides

Akli Ben Imeddourene*¹, Sophie Barbe¹, Jeremy Esque¹, Mounir Benkoulouche¹, Claire Moulis¹, Laurence Mulard², Magali Remaud-Siméon¹ and Isabelle André¹

¹Université de Toulouse; Laboratoire d'Ingénierie des Systèmes Biologiques et des Procédés, INSA, CNRS, INRA 135 Avenue de Rangueil, F-31077 Toulouse, France

²Institut Pasteur, Unité de Chimie des Biomolécules, 28 rue du Dr. Roux, F-75724 Paris Cedex 15, France

* benimedd@insa-toulouse.fr

Carbohydrates are essential biological molecules for living cells and they play a key role in molecular recognition. Most pathogens including bacteria, fungi and parasites, are surrounded by complex carbohydrate coats, which are essential to the host-pathogen crosstalk. In the case of *Shigella flexneri*, a family of Gram negative bacteria responsible for bacillary dysentery, these surface polysaccharides and glycans have been identified as major targets of protection against reinfection. The conception of glyco-bricks mimicking the polysaccharide moiety – O-antigen (O-Ag) – of the lipopolysaccharides from various serotypes is thus highly needed for research on shigellosis disease.

Our study is focused on the development of a synthetic route to access oligosaccharides mimicking the O-antigen motif of *S. flexneri*, which will rely on a combination of chemical synthesis and biocatalysis. One of the main challenge resides then in the identification of the appropriate enzyme that will have the required properties for desired catalytic reaction, by either taking advantage of substrate promiscuity of natural enzymes or creating the required substrate specificity by molecular engineering guided by computer-aided design.

Herein, we report how we used molecular modelling and molecular dynamics to gain rational insight on molecular and dynamic determinants that control enzyme-carbohydrate interactions. To this end, we carried out a comparative study of the performances of standard force fields, namely GLYCAM, ff14SB and CHARMM36 Force Fields, to ensure good confidence in simulation results. These results will be presented together with computational studies and experimental testing performed to understand how some natural enzymes could act on non-natural substrates.

This work was funded by the French National Research Agency (ANR Project CarbUniVax ANR-15-CE07).

Mots-clés : *Shigella flexneri*, lipopolysaccharide, Molecular Dynamics, GLYCAM, AMBER.

P3. Etude DFT de la réduction catalytique sélective de NO₂ par NH₃ dans la Cu-SSZ-13

Boutheïna Kerkeni¹, Céline Chizallet², David Berthout², Dorothée Berthomieu³

¹Faculté des Sciences de Tunis, Lab. Physique de la Matière Condensée, 2092 Université Tunis El Manar, Tunisia

²IFP Energies nouvelles, Institut Carnot IFPEN Transports Energie, 69360 Solaize, France

³Institut Charles Gerhardt Montpellier, UMR 5253 CNRS-ENSCM-UM, Montpellier, France

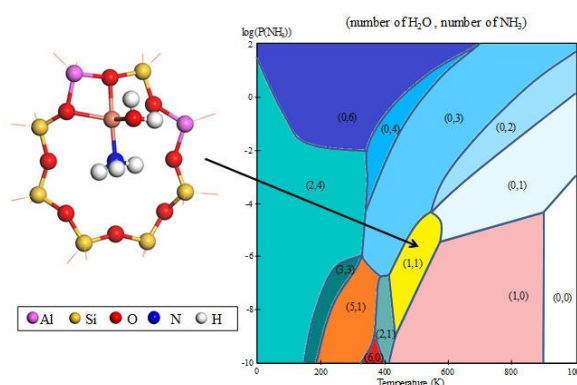
*dorothee.berthomieu@enscm.fr

La réduction catalytique sélective (SCR) des oxydes d'azote (NO_x, x=1,2) par l'ammoniac (NH₃) pour former N₂ est une technologie particulièrement efficace pour l'élimination des NO_x lors des émissions de gaz, en particulier dans le secteur des transports terrestres utilisant le diesel comme combustible.

Les zéolithes de type Cu-SSZ-13 présentent une activité catalytique notablement élevée.

L'objectif de cette étude est de déterminer des étapes et des mécanismes réactionnels du cycle catalytique de la NO₂-SCR. A cette fin, une approche théorique fondée sur des calculs DFT périodiques (code VASP et méthode PBE-PAW) avec la prise en compte des forces de dispersion par la méthode de Grimme, est utilisée. La zéolithe Cu-SSZ-13 est modélisée à l'aide d'une cellule rhomboédrique avec des rapports Si:Al=11:1 et Cu:Al=1:2. L'adsorption des espèces présentes dans la réaction de SCR, H₂O, NH₃, et NO₂ dans les sites d'adsorption de la zéolithe contenant le Cu dans le degré d'oxydation +II ont été étudiés. Enfin, des calculs de dynamique moléculaire ont permis de sélectionner les structures les plus stables.

Le travail présenté porte sur les résultats issus de la modélisation des sites d'adsorption possibles pour identifier les structures les plus stables et étudier la capacité de la Cu-SSZ-13 à adsorber des charges variables de molécules d'eau et d'ammoniac (nH₂O + mNH₃ avec (m + n ≤ 6)) sur le site actif Cu²⁺. Des diagrammes de phase décrivant le nombre de H₂O et NH₃ adsorbés en fonction de la température ont été construits avec succès. Les deux sites de cuivre à l'intérieur de deux différents sites, 6MR et 8MR de la zéolithe ont été étudiés, mettant en évidence que l'adsorption de NH₃ dans la Cu²⁺-SSZ-13 est plus forte que celle de H₂O et plus prononcée dans le cycle 8MR (Figure ci-contre) que le 6MR.



Les recherches ont bénéficié d'un financement du Programme Personnes (Actions Marie Curie) (FP7 / 2007-2013) dans le cadre de l'accord de subvention REA n. PCOFUND-GA-2013-609102. Les calculs ont été réalisés sur le projet IDRIS numéro 100551 et l'ENER110 à IFPEN.

Mots-clés : DFT, Dynamique moléculaire ; NO₂-SCR, Catalyse hétérogène ; diagrammes de phase

Références

- 1 Petitto, C and Delahay, G., *Chem. Eng. J.*, **264**, 404 (2015)
- 2 Paolucci, C. et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **53**, 11828 (2014)
- 3 Janssens, T.V.W. et al., *ACS Catal.*, **5**, 2832 (2015)
- 4 Borfecchia, E. et al., *Chem. Sci.*, **6**, 548 (2015)

P4. Multi-scale study of the influence of impurities on the oxygen solubility in nickel

M. David, D. Monceau, D. Connétable*

CIRIMAT, UMR 5085, CNRS, UPS, INPT, ENSIACET, 4 allée Émile Monso CS 44362, 31030 TOULOUSE Cedex 4

* damien.connetable@ensiacet.fr

The fundamental understanding of the oxygen dissolution and diffusion in metals is crucial to understand and predict their behavior in oxidant atmospheres. Experimental observations suggest that some interstitial species, in particular carbon or hydrogen, could modify oxygen permeability in nickel-based alloys [1]. We present in this poster a multi-scale approach (coupling first-principles calculations and a statistical approach) of the oxygen solubility taking into account interactions with others interstitials species and defects (vacancies) in nickel.

First, DFT calculations were performed to study and to compute the formation and segregation energies of small clusters made of vacancies (V), O, C and H atoms, located either in octahedral or tetrahedral positions. Most stable configurations are presented and analyzed. We show for example, that VX clusters (where X=O, H) have strong negative segregation energies. From these DFT results, we have extracted a set of pair interaction energies (X1-X2) according to the X1-X2 distance and the sites.

Finally, we discuss the impact of the V, C, H, O interactions on equilibrium concentration of each defect using a statistical approach based on these DFT parameters.

Références

1 "Experimental study of the interactions between oxidation and structural defects", S. Pérusin et al., Materials Science Forum vol. 461 (2004)

P5. Simulations en Dynamique Moléculaire des Liquides expansés par un gaz

Granero Fernandez Emanuel, Condoret Jean-Stéphane, Gerbaud Vincent*, Medina-Gonzalez Yaocihuatl**

Laboratoire de Génie Chimique, Université de Toulouse, CNRS, INPT, UPS, Toulouse, France

**vincent.gerbaud@ensiacet.fr*

***yaocihuatl.medinagonzalez@ensiacet.fr*

Les Liquides Expansés par un Gaz (LEGs) sont des liquides dont le volume a été expansé par un gaz sous pression [1]. L'incorporation d'un composant gazeux et l'expansion de la phase liquide conduisent aux variations dans les propriétés de solvation et de transport de la phase expansée. Ces nouvelles propriétés sont intermédiaires entre celles du liquide pur et celles du gaz [2], et elles peuvent être réglées de façon réversible en modifiant la pression. La modification des propriétés du LEG permet d'envisager son utilisation dans un large spectre d'applications, *i.e.* séparation, réactivité, fabrication des matériaux, etc. Le présent travail cherche à développer une étude computationnelle en Dynamique Moléculaire (DM) des acétates d'éthyle et méthyle quand ils sont expansés par CO₂ sous pression allant jusqu'à 12.0 MPa, à T= 298 et 393 K. A partir des données expérimentales de l'équilibre des phases, la densité et la viscosité de la phase expansée ont été calculées par DM. La précision de la méthode a été évaluée auparavant en comparant les résultats obtenus par simulation de deux solvants types comme l'acétone et le décane aussi expansés par CO₂ avec des données présentes dans la littérature.

Le potentiel de dynamique moléculaire nommé *Amber_Cornell_Extended* a été sélectionné après avoir effectué des tests sur les potentiels disponibles dans la Suite « Materials Processes and Simulations » (MAPS) de Scienomics. Les charges atomiques ont été calculées sur les géométries moléculaires optimisées par DFT/6-31+G** en utilisant la méthode du Potentiel Electrostatique (ESP). Pour le CO₂ le modèle de Harris-Yung a été utilisé. Les calculs ont été réalisés avec le supercalculateur EOS du CALMIP (projet n° P1535).

Figure 1 montre la densité de la phase expansée vs la fraction molaire. On observe une légère augmentation de la densité dans la zone de basse pression, puis une diminution en s'approchant aux alentours du point critique ($x_{\text{CO}_2} > 0.7$). On observe aussi un agrandissement de l'écart type (barres d'erreur) dû à la quantité croissante de molécules de CO₂ présentes dans le système et à ce que le champ de forces utilisé ne prend en considération le quadrupôle du CO₂, ce qui devient plus important quand la concentration de CO₂ augmente.

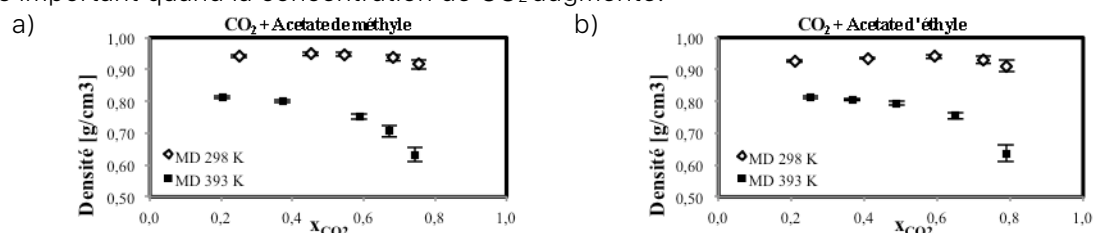


Figure. Densité de la phase expansée (g/cm³) vs fraction molaire du CO₂ pour l'acétate de a) méthyle et b) éthyle.

Conclusions

Les simulations de DM ont été utilisées pour calculer la densité des acétates de méthyle et d'éthyle expansés par le CO₂. À proximité du point critique du mélange l'écart type augmente, dû à ce que le champ de forces utilisé ne prend pas en considération le quadrupôle présent dans la molécule de CO₂.

Mots-clés : Dynamique moléculaire, liquides expansés par un gaz, CO₂, acétate de méthyle, acétate d'éthyle.

Références :

- 1 P. G. Jessop and B. Subramaniam, Chemical reviews, vol. 107, no. 6, pp. 2666–2694, 2007.
- 2 G. R. Akién and M. Poliakoff, Green Chemistry, vol. 11, no. 8, pp. 1083–1100, 2009.

P6. SEQUESTER: A Software Tool for the Analysis of Enzyme Sequence Structure and Function Correlation

Christopher M. Topham*, Jérémy Esque** and Isabelle André

Université de Toulouse; Laboratoire d'Ingénierie des Systèmes Biologiques et des Procédés, INSA, CNRS, INRA

**christopher.topham@insa-toulouse.fr;*

***jeremy.esque@insa-toulouse.fr*

Proteins evolve within a framework of structural and functional restraints that limit the type of substitutions observed at individual residue positions in the amino acid sequence. Structural and functional information provided by these restraints is embedded in protein family multiple sequence alignments (MSAs) in the form of evolutionary fingerprint motifs. SEQUESTER is a computational tool for the pre-treatment of protein sequence data and MSA analysis. Eight different algorithms for correlated mutation analysis (CMA) and Principal Component Analysis (PCA) of alignment data have been implemented for the exploration of coevolution of residue positions. The results of residue mutation analyses, prediction of intramolecular residue contacts and intermolecular protein-protein interactions that are useful in protein structure prediction and design can be plotted or projected onto 3D molecular structures for visual inspection. Examples of the utility of this latent information in deciphering sequence-structure-function relations in several enzyme families are presented.

Mots-clés : Enzyme, Sequence-Structure-Function Relations, Correlated Mutation Analysis, Multiple Sequence Alignment

P7. Des nano-conjugués d'or contre l'antibiorésistance : relations morphologie-stabilité

Xavier Fenouillet *, Magali Benoit, Nathalie Tarrat

CEMES-CNRS, 29 rue Jeanne Marvig 31055 CEDEX

* *xavier.fenouillet@cemes.fr*

A l'heure actuelle, des souches multi-résistantes de bactéries pathogènes apparaissent avec une fréquence croissante. De nouveaux mécanismes de résistance sont apparus, rendant la dernière génération d'antibiotiques inefficace. Nous sommes donc confrontés à un besoin urgent de systèmes antibactériens alternatifs. Très récemment, il a été montré que des nanoparticules d'or (AuNPs) conjuguées à des antibiotiques (nano-conjugués) sont des agents bactéricides puissants présentant des propriétés uniques allant jusqu'à contourner les mécanismes de résistance aux antibiotiques existant dans des souches de bactéries multi-résistantes [1]. De plus, la résistance aux AuNPs conjuguées à des antibiotiques se développe beaucoup plus lentement qu'à l'encontre de la dernière génération de molécules commerciales [2]. Dans ce contexte, la question qui est maintenant à l'ordre du jour est la modélisation de nanoparticules conjuguées présentant les propriétés désirées et le développement ultérieur d'une procédure de synthèse des nanostructures théoriquement prédites.

Dans cette affiche, nous présentons les résultats de calculs DFT réalisés sur des modèles d'interfaces nanoparticule d'or – antibiotique. La structure des interfaces entre l'ampicilline, un antibiotique de la famille des b-lactames, et les trois facettes présentes à la surface d'une nanoparticule d'or est décrite, montrant le fort caractère covalent de l'interaction nanoparticule/antibiotique et révélant que l'orientation de la molécule est favorable à son activité bactéricide [3]. De plus, une étude de l'adsorption en fonction du taux de couverture est présentée, démontrant l'influence des interactions intermoléculaires dans la stabilisation du système, ainsi qu'une possible auto-organisation.

Mots-clés : nanoparticule d'or, b-lactames, nanoconjugués, antibiorésistance, DFT

Références :

1. X. Li, S. M. Robinson, A. Gupta, K. Saha, Z. Jiang, D. F. Moyano, A. Sahar, M. A. Riley, V. M. Rotello, **ACS Nano** **8**, 10682-10686 (2014).
2. J. Bresee, C. M. Bond, R. J. Worthington, C. A. Smith, J. C. Gifford, C. A. Simpson, C. J. Carter, G. Wang, J. Hartman, N. A. Osbaugh, R. K. Shoemaker, C. Melander, D. L. Feldheim, **JACS** **136**, 5295-5300 (2014).
3. N. Tarrat, M. Benoit, M. Giraud, A. Ponchet and M-J. Casanove, *Nanoscale*, **7**, 14515 (2015).

P8. Atomic scale modeling to understand how matter organizes during growth of ultrathin materials in close relation with elaboration process parameters: climbing the scales

Mathilde Guiltat¹, Nicolas Salles¹, Nicolas Richard², Marie Brut¹, Georges Landa¹, Anne Hemeryck^{1*}

¹LAAS-CNRS,

²CEA-DAM

* anne.hemeryck@laas.fr

An absolute control at the atomic scale of the material growth during the technological processes, to tailor composition of the layers, and especially to master the formation of interfaces is necessary since this is this atomic arrangement at the nanoscale level which will impact decisively and ensure final properties to the achieved materials. Developing the means of predicting and controlling the structures of integrated materials at the nanometre scale will thus help to push forward their elaboration.

In this context, predictive simulation of the deposition process is strategic. We present a multi-levels approach conducted with the objective to provide an original TCAD tool endowed by an atomistic granularity, as a new tool-for-the-engineer dedicated to the design of tailored integrated material. A multi-levels modeling study is detailed where atomic-scale observations are used as input data to parameterize a macroscopic code, based on a kinetic Monte Carlo methodology. This code is able to simulate vapor-like deposition process and to predict interface composition as a function of applied process parameters. The developed code will help to understand and evaluate the influence of experimental conditions on the material nanostructuring, linking design and manufacturing. In this poster, the deposition of CuO on Al(111) substrate is described.

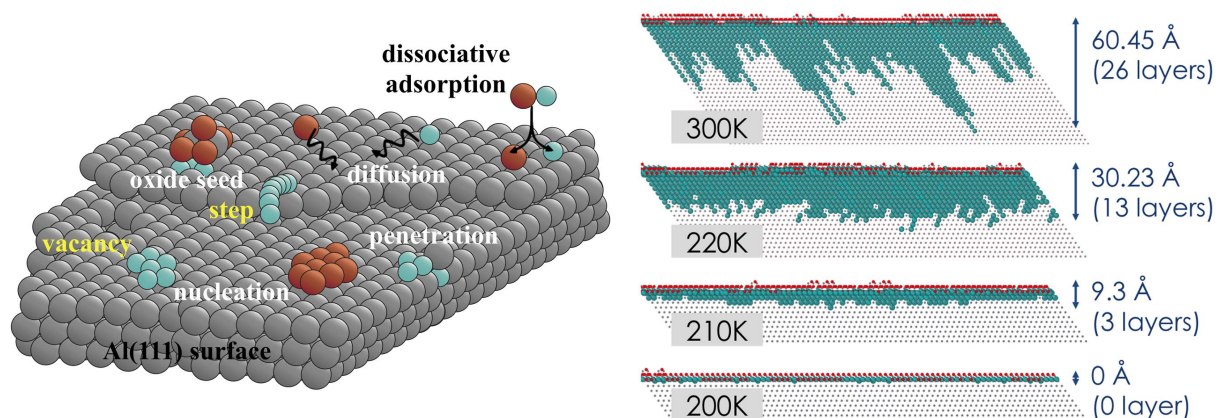


Figure. Left) Schematic of investigated local mechanisms using DFT, where Al, Cu, and O are represented by gray, blue and red balls, respectively [1-3]. Right) Effect of the substrate temperature on the thickness of the interfacial layer during the deposition of CuO on Al(111) using kMC code [4].

Mots-clés: Multiscale modeling, kinetic Monte Carlo, DFT, diffusion, growth, nanostructuring

References

- 1 C. Lanthony, et al., *ACS Applied Materials & Interfaces* 6 (2014) 15086
- 2 C. Lanthony, et al., *Journal of Chemical Physics* **137** (2012) 094707
- 3 M Guiltat, et al., *Surface Science* 657 (2017) 79-89
- 4 M Guiltat, et al., *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 25 (2017) 064005

P9. Strain-driven diffusion process during silicon oxidation investigated by coupling Density Functional Theory and Activation Relaxation Technique

Nicolas Salles¹, Nicolas Richard², Normand Mousseau³, Anne Hemeryck^{1*}

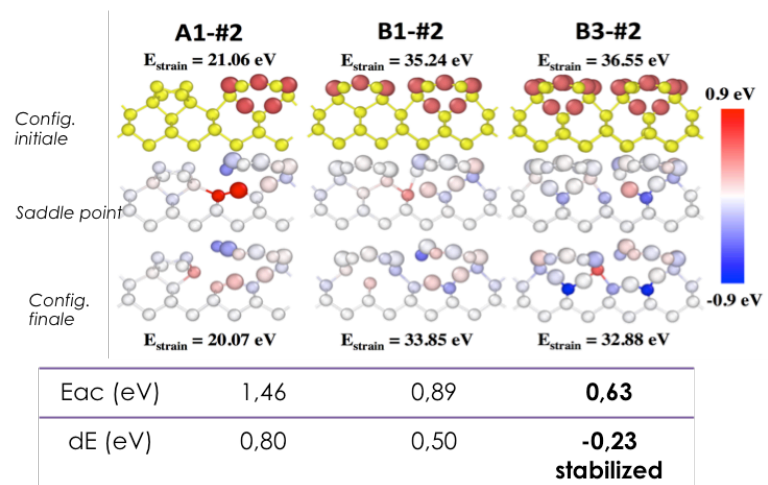
LAAS-CNRS,
CEA-DAM
Université de Montréal

* anne.hemeryck@laas.fr

Le LAAS-CNRS et le CEA-DAM s'intéressent depuis plus d'une dizaine d'années aux mécanismes de formation de l'interface Si/SiO₂, interface toujours présente dans les dispositifs électroniques. La méthode jusque là appliquée consistait en une approche multi-niveaux couplant Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) pour identifier et caractériser les mécanismes de croissance (structures, diffusions et barrières d'activation) et Monte Carlo cinétique, pour simuler la croissance avec des systèmes de grande taille et en relation avec les paramètres des procédés technologiques [1]. Cependant à haut recouvrement, l'utilisation seule de la DFT ne permet pas d'avancer dans cette prospection des mécanismes atomistiques, l'espace des configurations étant devenu trop complexe pour une exploration « manuelle et intuitive ».

Afin d'apporter un nouveau point de vue sur ces mécanismes atomistiques, nous avons couplé la méthode Activation Relaxation Technique nouvelle (ARTn) [2] avec un code de DFT (VASP [3]). ARTn permet d'explorer la Surface d'Énergie Potentielle et de déterminer les états de transition, i.e. les différentes configurations possibles et leur barrière d'énergie correspondante sans connaissance préalable de la configuration finale à l'aide d'un algorithme de Lanczos. L'utilisation de la DFT, couplée avec ARTn, ici permet de décrire au mieux la chimie complexe aux interfaces.

Ce couplage effectif ARTn/DFT permet de mettre en évidence la relation entre la cinétique des mécanismes d'oxydation du silicium et la contrainte à l'interface à l'aide d'un modèle de Keating [4] pour quantifier localement la contrainte. Nous identifions des mécanismes de diffusion de l'oxygène non envisageables énergétiquement à de faibles recouvrements qui deviennent favorables pour l'évolution du système quand le recouvrement est suffisamment élevé [5]. A ce stade de recouvrement, l'énergie de contrainte emmagasinée à l'interface devient suffisamment grande pour favoriser les diffusions des atomes à l'interface Si/SiO₂. Ces diffusions relâchent alors la contrainte accumulée dans le système.



Mots clés : croissance, interface, diffusion, contrainte, exploration du paysage énergétique, Activation Relaxation Technique.

Références

- 1 A. Hemeryck, et al., Phys. Rev. B 79, 035317 (2009), A. Hemeryck, et al, Surf. Sci. 603, 2132 (2009)
- 2 G. T. Barkema and N. Mousseau, Phys. Rev. Lett. 77, 4358 (1996); R. Malek and N. Mousseau, Phys. Rev. E 62, 7723 (2000); E. Machado-Charry, et al., J. Chem. Phys. 135, 034102 (2011).
- 3 G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B 54, 11169(1996); G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B 59, 1758 (1999).
- 4 S. Lee, et al., J. Appl. Phys. 109, 113519 (2011)
- 5 N. Salles, et al., J. Chem. Phys. 147 (2017) 054701 - doi: 10.1063/1.4996206

P10. Simulation multi-échelle de l'influence de l'irradiation sur les composants électroniques

Antoine Jay*¹, Nicolas Richard², Anne Hemeryck³, Layla Martin-Samos⁴, Normand Mousseau⁵, Vincent Goiffon¹, Mélanie Raine²

¹ ISAE, supaero, Toulouse, France,

² CEA-DAM, Bruyère le Châtel, France,

³ CNRS-LAAS, Toulouse, France

⁴ University of Nova Gorica, Slovénie,

⁵ Université de Montréal, Canada,

*antoine.jay@isae.fr

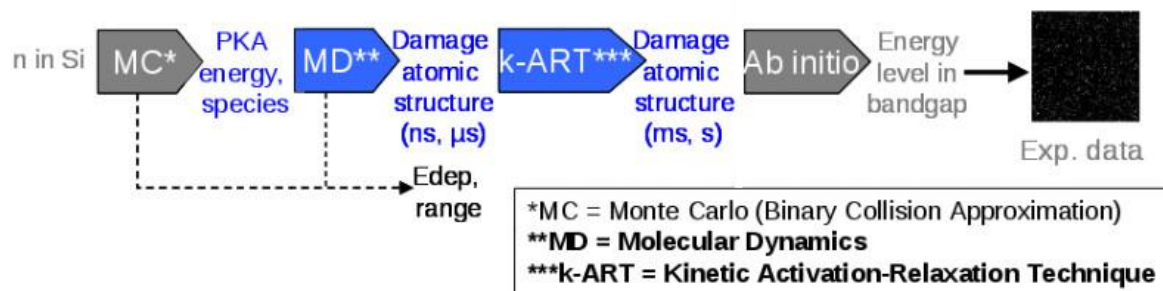


Figure. Projet de simulation global.

Les composants irradiés subissent des dommages dans leur structure cristalline qui dégradent leurs propriétés électroniques. En effet, les défauts créés lors de la cascade de collisions possèdent des états électroniques dans le gap qui modifient le taux de génération ou d'absorption du semi-conducteur utilisé. Le projet présenté sur la figure ci-dessus a pour but de modéliser l'ensemble de ce processus depuis la particule incidente responsable de l'irradiation, jusqu'au taux de génération, en passant par la formation de la cascade, la guérison des clusters de défauts, la variation des états métastables, et le calcul des niveaux électroniques. Chaque étape nécessite différentes techniques listées ci-après et peut être vérifiée en comparant avec les observations faites par exemple sur le courant d'obscurité des capteurs d'images CMOS. Le matériau utilisé comme application de ce projet est le silicium.

Mots-clés : ab-initio, états électroniques chargés, approximation GW, NEB, kinetic activation relaxation technique (k-ART), binary collision approximation, dynamique moléculaire, modèle à deux températures, théorie de l'état de transition, théorie SRH.

Références

- 1 M.Raine, et al, IEEE Trans. Nucl. Sc. 64, 133 (2017).
- 2 A. Jay, et al, IEEE Trans. Nucl. Sc. 64, 141 (2017).

P11. Implémentation des polarisabilités distribuées sur les centroïdes des orbitales localisées dans le package TINKER

E. Norbert-Agaisse *¹, N. Gresh², J-P. Piquemal³

¹ CTMM, UM

² LCT, UPMC

³ LCT, UPMC

* elliott.norbert-agaisse@umontpellier.fr

Les champs de forces classiques se sont révélés être une méthode de choix pour l'étude de systèmes de plus en plus grands, moyennant des approximations. Toutefois les enjeux actuels en terme de précision sur les énergies obligent les théoriciens à travailler sur la réduction de l'erreur relative.

Bien que la polarisabilité soit depuis longtemps introduite dans les champs de forces dits polarisables, elle est généralement centrée sur les atomes. Une meilleure distribution la voudrait là où sont « réellement » les électrons, soit, les orbitales localisées.

C'est le cas dans le champs de force SIBFA (Sum of Interactions Between Fragments Ab initio computed) dans lequel les polarisabilités distribuées sont obtenues à l'aide du logiciel GAMESS au niveau Hartree Fock.

La polarisabilité étant une propriété électronique de la matière, sa bonne description requière d'inclure un haut niveau de corrélation dans le calcul. Nous avons alors développé une méthode reposant sur un facteur correctif des polarisabilités distribuées Hartree Fock. La qualité des résultats se révéla assimilable voir meilleure que celle de méthodes topologiques fastidieuses déjà décrites dans la littérature.

Mots-clés : Champs de force, Tinker, polarisabilités, centroïdes, automatisation

Références

- 1 Y. Shi, P. Ren, M. Schnieders and J.P. Piquemal. Reviews in Computational Chemistry. 2015, 28
- 2 J.M. Foster and S.F. Boys. Revs. Modern Phys. 1960, 32, 296
- 3 D.R. Garmer and W.J. Stevens. J. Phys. Chem. 1989, 93, 8263-8270
- 4 F. Aviat, A. Levitt, B. Stamm, Y. Maday, P. Ren, J.W. Ponder, L. Lagardère and J.P. Piquemal. J. Chem. Theory Comput. 2017, 13, 180-190

LABORATOIRES PARTICIPANTS

**CALMIP Calcul en Midi Pyrénées**

Espace Clément ADER, 3 rue Caroline Aigle, 31400 Toulouse
<https://www.calmip.univ-toulouse.fr/spip/>

**CEMES Centre d'Elaboration de Matériaux et d'Etudes Structurales**

29, rue Jeanne Marvig, BP 94347, 31055 Toulouse cedex 4
<http://www.cemes.fr/>

**CIRIMAT Centre Inter-universitaire de Recherche et d'Ingénierie des Matériaux**

4 allée Emile Monso, BP 44362, 31030 Toulouse cedex 4
<http://www.cirimat.cnrs.fr>

**GET Géosciences Environnement Toulouse**

UMR 5563 CNRS / UR 234 IRD / UPS, 14, avenue Édouard Belin, 31400 Toulouse
<http://www.get.obs-mip.fr>

**ICGM Institut Charles Gerhardt Montpellier**

2 Place Eugène Bataillon, 34090 Montpellier
<https://www.icgm.fr/>

**IMFT Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse**

2 Allées du Pr Camille Soula, 31400 Toulouse
<http://www.imft.fr/>

**MIAT Unité de Mathématiques et Informatiques Appliquées de Toulouse, INRA**

INRA Auzeville BP 52627 31326 Castanet Tolosan cedex
<https://mia.toulouse.inra.fr/Accueil>

**IPBS Institut de Pharmacologie et de Biologie Structurale**

BP64182, 205 route de Narbonne, 31077 Toulouse cedex 4
<http://www.ipbs.fr/?lang=en>

**IPREM Institut des sciences analytiques et physico-chimique pour l'environnement et les matériaux**

2 Avenue du Président Pierre Angot, 64000 Pau,
<http://iprem.univ-pau.fr/fr/index.html>

**ISAE Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace**

10, avenue Édouard-Belin, BP 54032 - 31055 Toulouse cedex 4
<http://www.isae.fr>



LAAS Laboratoire d'Analyse et d'Architecture des Systèmes
7 Avenue du Colonel Roche, BP 54200, 31031 Toulouse cedex 4
<https://www.laas.fr/public/fr>



LCAR Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité
Université Paul Sabatier - Bât. 3R1b4, 118 route de Narbonne, 31062 Toulouse cedex 09
<http://www.lcar.ups-tlse.fr>



LCC Laboratoire de Chimie de Coordination
205 route de Narbonne, BP 44099, 31077 Toulouse cedex 4
<http://www.lcc-toulouse.fr/lcc/>



LCPQ Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques
Université Paul Sabatier - Bat. 3R1b4 - 118 route de Narbonne 31062 Toulouse Cedex 09
<http://www.lcpq.ups-tlse.fr>



LGC Laboratoire de Génie Chimique



LISBP Laboratoire d'Ingénierie des Systèmes Biologiques et des Procédés
UMR INSA/CNRS 5504 UMR INSA/INRA 792, 135 Avenue de Ranguel, 31077 Toulouse cedex 4
<http://www.lisbp.fr/fr/index.html>



LMDC Laboratoire Matériaux et Durabilité des Constructions
INSA-UPS Génie Civil, 135, Avenue de Ranguel, 31077 Toulouse cedex 4
<http://www-lmdc.insa-toulouse.fr/acceuil.php>



LPCNO Laboratoire de Physique et Chimie des Nano-Objets
INSA 135 avenue de Ranguel, 31077 Toulouse cedex 4
<http://lpcno.insa-toulouse.fr>



LPT Laboratoire de Physique Théorique
Université Paul Sabatier - Bat. 3R1b4 - 118 route de Narbonne 31062 Toulouse Cedex 09
<http://www.lpt.ups-tlse.fr>



PROMES Procédés Matériaux et Energie Solaire
Tecnosud, Rambla de la thermodynamique, 66100 PERPIGNAN
<https://www.promes.cnrs.fr/>

LISTE DES PARTICIPANTS

A				
Abdou Ibro	Mohamed	<i>abdouibr@insa-toulouse.fr</i>	LMDC	
Alary	Fabienne	<i>fabienne.alary@irsamc.ups-tlse.fr</i>	LCPQ	O20 O21
Allouche	David	<i>david.allouche@toulouse.inra.fr</i>	INRA	P1
Alvarez Lamsfus	Carlos	<i>c_alvarez_lamsfus@hotmail.com</i>	LPCNO	O2
André	Isabelle	<i>isabelle.andre@insa-toulouse.fr</i>	LISBP	P1 P2 P6
Arras	Rémi	<i>remi.arras@cemes.fr</i>	CEMES	
B				
Bancaud	Aurélien	<i>aurelien.bancaud@laas.fr</i>	LAAS	
Barbe	Sophie	<i>sophie.barbe@insa-toulouse.fr</i>	LISBP	P1 P2
Barozet	Amélie	<i>abarozet@laas.fr</i>	LAAS	
Barros	Noémi	<i>noemi.barros@univ-perp.fr</i>	PROMES	
Bathellier	Adrien	<i>bathelli@insa-toulouse.fr</i>	LPCNO	
Belhboub	Anouar	<i>belhboub@chimie.ups-tlse.fr</i>	CIRIMAT	
Ben Amor	Nadia	<i>benamor@irsamc.ups-tlse.fr</i>	LCPQ	O17
Ben Imeddourene	Akli	<i>benimedd@insa-toulouse.fr</i>	LISBP	P2
Benoit	Magali	<i>magali.benoit@cemes.fr</i>	CEMES	O10 P7
Berthomieu	Dorothee	<i>dorothee.berthomieu@enscm.fr</i>	ICGM	P3
Blanchard	Marc	<i>marc.blanchard@get.omp.eu</i>	GET	O11
Bonvoisin	Jacques	<i>jbonvoisin@cemes.fr</i>	CEMES	O3
Bouju	Xavier	<i>Xavier.Bouju@cemes.fr</i>	CEMES	
Brut	Marie	<i>marie.brut@laas.fr</i>	LAAS	O14 P8
Bulteau	Yann	<i>yb05@free.fr</i>	CIRIMAT	
C				
Caffarel	Michel	<i>michel.caffarel@irsamc.ups-tlse.fr</i>	LCPQ	O4 O5
Cagnon	Hugo	<i>cagnonhugo@gmail.com</i>	LMDC	
Carbonnière	Philippe	<i>philippe.carbonniere@univ-pau.fr</i>	IPREM	O18
Chavent	Matthieu	<i>matthieu.chavent@ipbs.fr</i>	IPBS	O13
Combe	Nicolas	<i>combe@cemes.fr</i>	CEMES	
Connétable	Damien	<i>damien.connetable@ensiacet.fr</i>	CIRIMAT	O9 P4
Cortés	Juan	<i>juan.cortes@laas.fr</i>	LAAS	O7 P1
Cruz Rodríguez	Lidice	<i>lidicecruzr@gmail.com</i>	LCAR	O6
Cuny	Jérôme	<i>jerome.cuny@irsamc.ups-tlse.fr</i>	LCPQ	
Czaplicki	Georges	<i>cgeorge@ipbs.fr</i>	IPBS	O15
D				
Del Rosal	Iker	<i>idel_ros@insa-toulouse.fr</i>	LPCNO	
Dixon	Isabelle	<i>isabelle.dixon@irsamc.ups-tlse.fr</i>	LCPQ	O20
Djafari Rouhani	Mehdi	<i>djafari@laas.fr</i>	LAAS	
du Manoir	Milena	<i>milena.du-manoir@inserm.fr</i>	LAAS/INSERM	
E				
Escriba	Christophe	<i>christophe.escriba@laas.fr</i>	LAAS	
Esque	Jeremy	<i>esque@insa-toulouse.fr</i>	LISBP	P2 P6
Estana	Alejandro	<i>aestana@laas.fr</i>	LAAS	O7
Estivalezes	Jean-Luc	<i>jean-luc.estivalezes@imft.fr</i>	IMFT/CALMIP	O12
Etienne	Thibaud	<i>thibaud.etienne@umontpellier.fr</i>	ICGM	O19
F				
Farouil	Léa	<i>farouil@irsamc.ups-tlse.fr</i>	LCPQ	O21
Fenouillet	Xavier	<i>xavier.fenouillet@cemes.fr</i>	CEMES	O7
G				
Garniron	Yann	<i>garniron@irsamc.ups-tlse.fr</i>	LCPQ	O5
Gerber	Iann	<i>igerber@insa-toulouse.fr</i>	LPCNO	
Gonzalez Gomez	Roberto	<i>roberto.gonzalez@lcc-toulouse.fr</i>	LCC	
Granero Fernandez	Emanuel	<i>emanuel.granerofernandez@ensiacet.fr</i>	LGC	P5
Guilhat	Mathilde	<i>mathilde.guilhat@laas.fr</i>	LAAS	P8
H				
Halberstadt	Nadine	<i>Nadine.Halberstadt@irsamc.ups-tlse.fr</i>	LCAR	O16
Hallez	Yannick	<i>yannick.hallez@univ-tlse3.fr</i>	LGC	
Hémeryck	Anne	<i>anne.hemeryck@laas.fr</i>	LAAS	O8 O14 P8 P9 P10

Heraud	Jordan	<i>heraud.jordan@gmail.com</i>	LPT	
Herrero Saboya	Gabriela	<i>gabiherrero94@gmail.com</i>	CEA-DAM	
Hliwa	Mohamed	<i>hliwa@cemes.fr</i>	CEMES	O3
Hoggan	Philip	<i>philip.hoggan@uca.fr</i>	Institut Pascal, UCA	
Hoyau	Sophie	<i>sophie.hoyau@irsamc.ups-tlse.fr</i>	LCPQ	
I				
Ispas	Simona	<i>simona.ispas@umontpellier.fr</i>	L2C	
J				
Jaffrelot Inizan	Théo	<i>theo.jaffrelotinizan@ensiacet.fr</i>	CIRIMAT	
Jay	Antoine	<i>antoine.jay@isae.fr</i>	ISAE	O8 P10
Jolibois	Franck	<i>franck.jolibois@univ-tlse3.fr</i>	LPCNO	
L				
Lacaze-Dufaure	Corinne	<i>corinne.dufaure@ensiacet.fr</i>	CIRIMAT	
Lahrar	El Hassane	<i>lahrar.el@gmail.com</i>	CIRIMAT	
Landa	Georges	<i>georges.landa@laas.fr</i>	LAAS	O14 P8
Langlais	Véronique	<i>Veronique.langlais@cemes.fr</i>	CEMES	O3
Larrieu	Guilhem	<i>glarrieu@laas.fr</i>	LAAS	
Leichle	Thierry	<i>tleichle@laas.fr</i>	LAAS	
Lepetit	Bruno	<i>bruno.lepetit@irsamc.ups-tlse.fr</i>	LCAR	
Lepetit	Christine	<i>christine.lepetit@lcc-toulouse.fr</i>	LCC	O1
Loos	Pierre-François	<i>loos@irsamc.ups-tlse.fr</i>	LCPQ	O4 O5
Louyriac	Elisa	<i>louyriac@insa-toulouse.fr</i>	LPCNO	
M				
Malfreyt	Patrice	<i>patrice.malfreyt@univ-bpclermont.fr</i>	ICCF, UCA	O13
Manzoni	Florent	<i>manzoni@insa-toulouse.fr</i>	LMDC	
Martin-Samos	Layla	<i>lmartinsamos@gmail.com</i>	CNR, Italie	O14 O8 P10
McCabe	Karl	<i>mccabek1@tcd.ie</i>	TCD, Ireland/LPCNO	
Megchiche	El Hocine	<i>megchiche_elhocine@mail.ummt0.dz</i>	LCPQ/UMMTO	
Méheut	Merlin	<i>merlin.meheut@get.omp.eu</i>	GET	O10
Merlet	Céline	<i>merlet@chimie.ups-tlse.fr</i>	CIRIMAT	O12
Moukapir	Amine	<i>amine.moukapir@gmail.com</i>	CEMES	O3
N				
Norbert-Agaisse	Eliott	<i>eliott.norbert-agaisse@umontpellier.fr</i>	ICGM	P11
P				
Poteau	Romuald	<i>romuald.poteau@univ-tlse3.fr</i>	LPCNO	
Puech	Pascal	<i>pascal.puech@cemes.fr</i>	CEMES	
R				
Raynaud	Christophe	<i>Christophe.Raynaud1@umontpellier.fr</i>	ICGM	
Renon	Nicolas	<i>nicolas.renon@univ-tlse3.fr</i>	CALMIP	O12
Richard	Nicolas	<i>nicolas.richard@cea.fr</i>	CEA-DAM	O8 P8 P9 P10
S				
Scemama	Anthony	<i>scemama@irsamc.ups-tlse.fr</i>	LCPQ	O4 O5
Schahl	Adrien	<i>adrienschahl@hotmail.fr</i>	LPCNO	
Sellier	Alain	<i>alain.sellier0359@orange.fr</i>	LMDC	
Soupart	Adrien	<i>adrien.soupart@irsamc.ups-tlse.fr</i>	LCPQ	O20
Spiegelman	Fernand	<i>fernand.spiegelman@irsamc.ups-tlse.fr</i>	LCPQ/CFCAM-FR-GSO	O11
Stigliani	Jean-Luc	<i>jean-luc.stigliani@lcc-toulouse.fr</i>	LCC	
Suaud	Nicolas	<i>suaud@irsamc.ups-tlse.fr</i>	LCPQ	
T				
Tang	Hao	<i>hao.tang@cemes.fr</i>	CEMES	
Tarrat	Nathalie	<i>nathalie.tarrat@cemes.fr</i>	CEMES	P7
Teillet	Jeffrey	<i>jeffrey.teillet@laas.fr</i>	LAAS	
Tichauer	Ruth	<i>rhtichauer@laas.fr</i>	LAAS	O14
Topham	Christopher	<i>christopher.topham@insa-toulouse.fr</i>	LISBP	P6
V				
Verdier	Jérôme	<i>verdier@insa-toulouse.fr</i>	LMDC	
Vindel Zandbergen	Patricia	<i>patricia.vindel@irsamc.ups-tlse.fr</i>	LCAR	O16

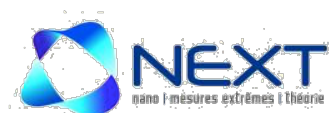
COMITE D'ORGANISATION

Marie Brut (LAAS, UPS, Toulouse)
Anne Hémercyck (LAAS, CNRS, Toulouse)
Fabienne Alary (LCPQ, UPS, Toulouse)
Iker Del Rosal (LPCNO, UPS, Toulouse)
Corinne Dufaure-Lacaze (CIRIMAT, INP, Toulouse)
Georges Landa (LAAS, CNRS, Toulouse)
Nathalie Tarrat (CEMES, CNRS, Toulouse)

COMITE SCIENTIFIQUE

Marie Brut (LAAS, UPS, Toulouse)
Anne Hémercyck (LAAS, CNRS, Toulouse)
Fabienne Alary (LCPQ, UPS, Toulouse)
Iker Del Rosal (LPCNO, UPS, Toulouse)
Phuong Mai Dinh (LPT, CNRS, Toulouse)
Jean-Luc Estivalezes (ONERA, IMFT, Directeur de CALMIP, Toulouse)
Corinne Dufaure-Lacaze (CIRIMAT, INPT, Toulouse)
Iann Gerber (LPCNO, INSA, Toulouse)
Georges Landa (LAAS, CNRS, Toulouse)
Christine Lepetit (LCC, CNRS, Toulouse)
Nicolas Renon (responsable calcul scientifique CALMIP, UPS, Toulouse)
Nathalie Tarrat (CEMES, CNRS, Toulouse)
Philippe Carbonnière (IPREM, UPPA, Pau)
Dorothee Berthomieu (ICGM, CNRS, Montpellier)
Simona Ispas (Lab Charles Coulomb, Univ Montpellier, Montpellier)

NOS SPONSORS



INFORMATIONS PRATIQUES

Mixing Event au **Hoegaarden Café**, 52, Route de Narbonne, Toulouse

S'y rendre

En bus : Depuis Université Paul Sabatier,
Ligne 34– Direction Arènes, Toulouse
Arrêt Pouset

Temps estimé : ~ 5 min

A pied ou en voiture :

