

Méthodes ab initio pour les nanosciences

L'apport des ondelettes

Thierry Deutsch
CEA Grenoble, DSM/INAC

Nano : objets et technologies

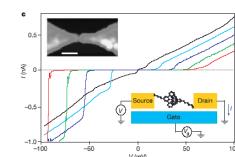
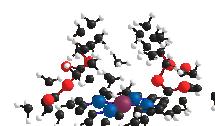
L. Genovese, S. Goedecker, M. Ospici

CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

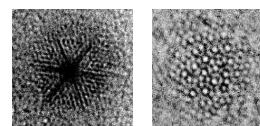
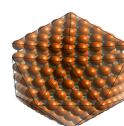
Journées Teratec - 4/6/2008

Quelques « briques de base » en nanosciences...

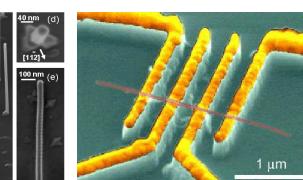
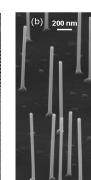
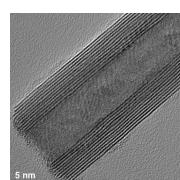
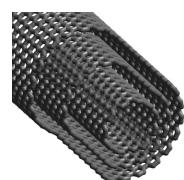
- Molécules :



- Agrégats, nanocristaux :



- Nanotubes de carbone, nanofils :



CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

Journées Teratec - 4/6/2008

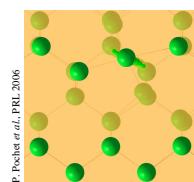
Les enjeux de la simulation numérique en nanosciences

Simulation **atomistique** nécessaire à l'échelle du nanomètre.

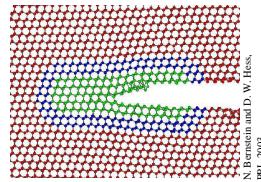


Deux enjeux :

- Modéliser les propriétés électroniques et mécaniques des **matériaux** à l'échelle atomique pour :
 - Affiner notre compréhension de la physique des dispositifs actuels.
 - Anticiper et repousser les limites des technologies émergentes.



Comment les lacunes migrent-elles dans le silicium ?



Comment une fracture se propage-t-elle à l'échelle atomique ?

CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

Journées Teratec - 4/6/2008

Les enjeux de la simulation numérique en nanosciences

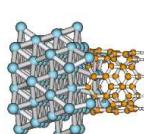
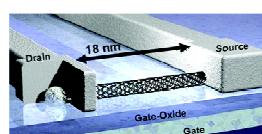
Simulation **atomistique** nécessaire à l'échelle du nanomètre.



Deux enjeux :

- Modéliser les propriétés électroniques et mécaniques des **matériaux** à l'échelle atomique pour :
 - Affiner notre compréhension de la physique des dispositifs actuels.
 - Anticiper et repousser les limites des technologies émergentes.

- Simuler les **nano-objets** pour comprendre et optimiser leurs propriétés:
 - Structurales,
 - Optiques, [Sources de lumière, photovoltaïque...]
 - de Transport... [Nanoélectronique]



CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

Journées Teratec - 4/6/2008

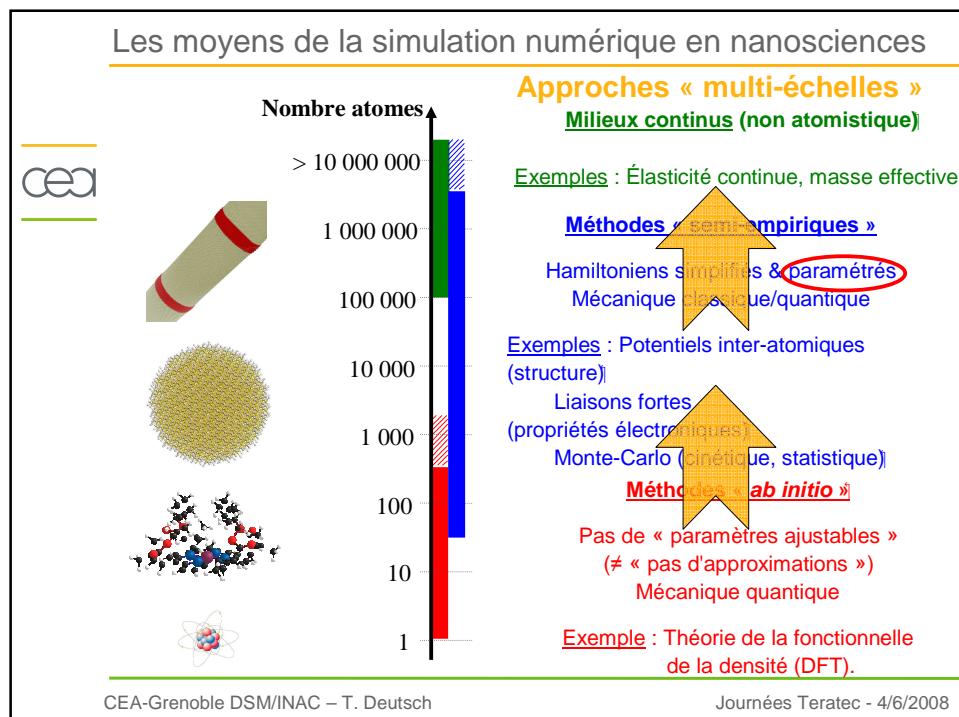
Problèmes à résoudre



Électronique du futur

Thématiques	Nanoscope structure & procédés	Nanospectromètres propriétés
CMOS ultime	Diffusion, implantation, substrat (SOI), gate stack, channel	
Nano-objets nanofils, nanotubes	Composition, auto-organisation (3D)	Effets quantiques, transport électronique optique, thermo-électricité
Électronique moléculaire	Greffage, fonctionnalisation	
Spintronique	Structure magnétique	Cycle d'hystérésis, transport de spin
NEMS	Conception	Transfert thermique, effet de charge, mécanique
Nano-caractérisation	Structures et défauts	Spectroscopie, microscopie

CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch Journées Teratec - 4/6/2008



Les méthodes *ab initio*

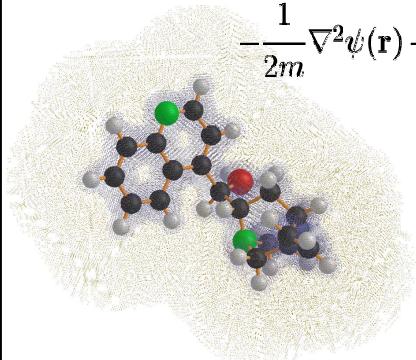
La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)



- Calcule l'énergie totale d'un solide ou molécule dans son état *fondamental* (Hohenberg & Kohn 1964, Kohn & Sham 1965).

- Une fonction d'onde (champ de valeurs, ψ) par électron

$$-\frac{1}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V_{\text{ions}}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) + V_{\text{hxc}}[\psi](\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r})$$



Calculs intensifs (10 à 1 000 atomes)
selon les calculateurs

CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

Journées Teratec - 4/6/2008

Représentation des fonctions d'onde : deux grandes familles



Ondes planes
physique (matériaux)

- Système périodique
- Maillage uniforme
- Mauvaise parallélisation FFT (beaucoup de petits transferts)
- Excellent conditionnement
- Pas ordre N

Gaussiennes
chimie (molécules)

- Bases localisées à adapter
- Non systématique
- Mauvais conditionnement
- Pas ordre N

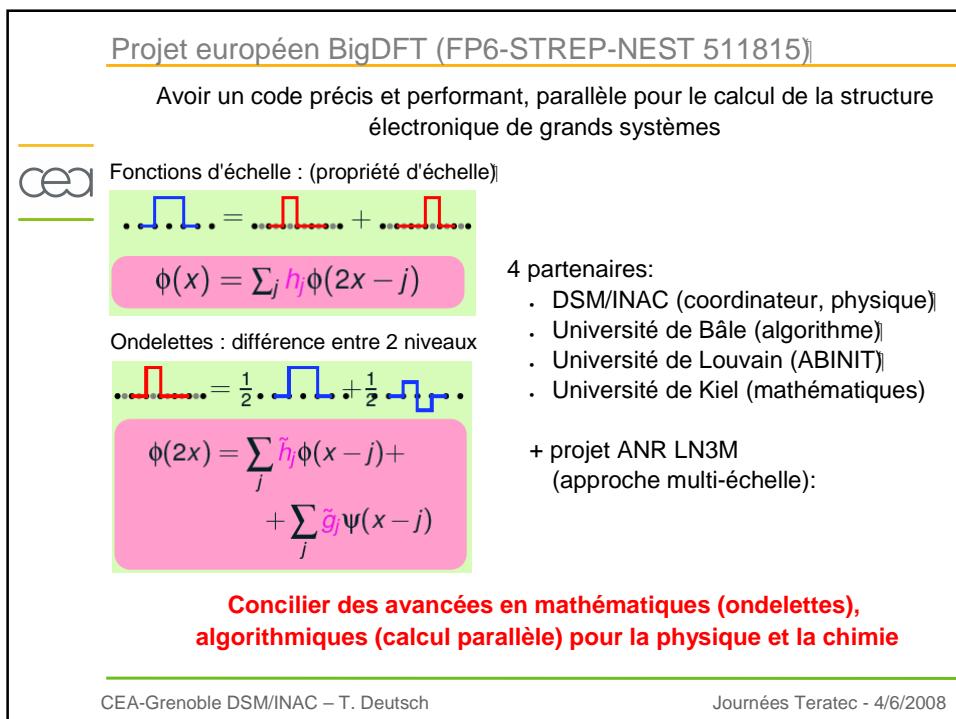
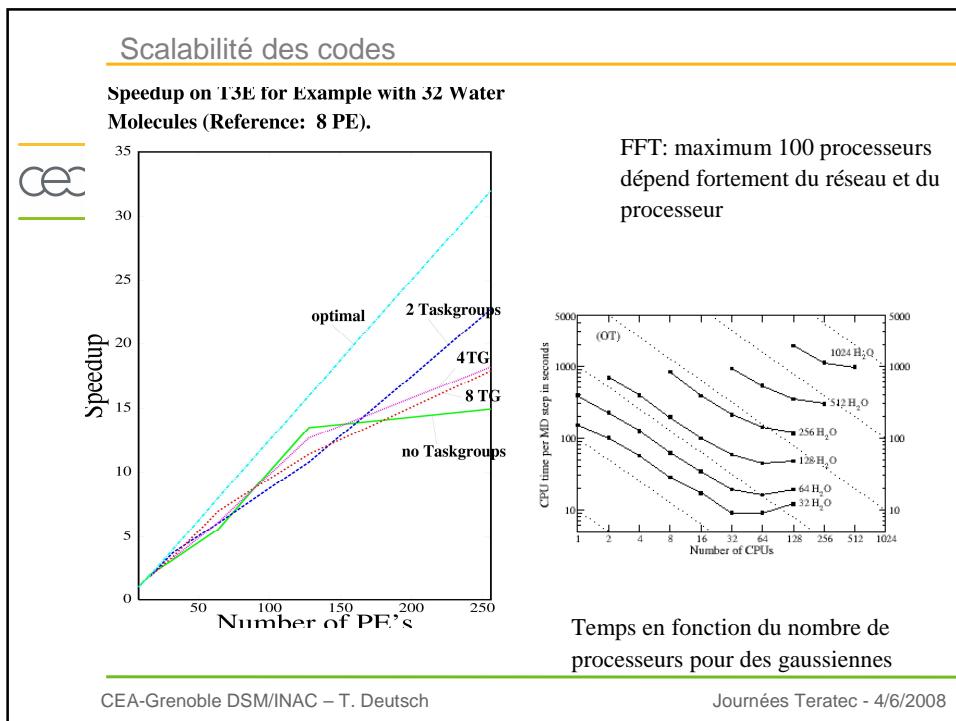
Nécessité d'une base en espace réel pour

- Adaptivité du maillage
- Parallélisation massive (accélération)

Meilleure base mathématique (propriété d'échelle)
Les ondelettes

CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

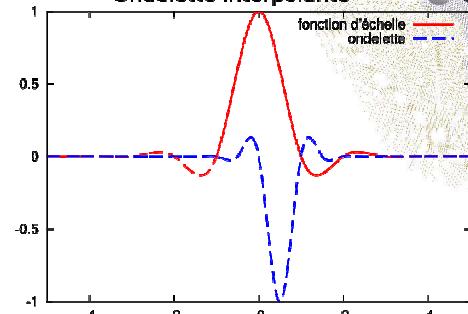
Journées Teratec - 4/6/2008



Adaptativité du maillage

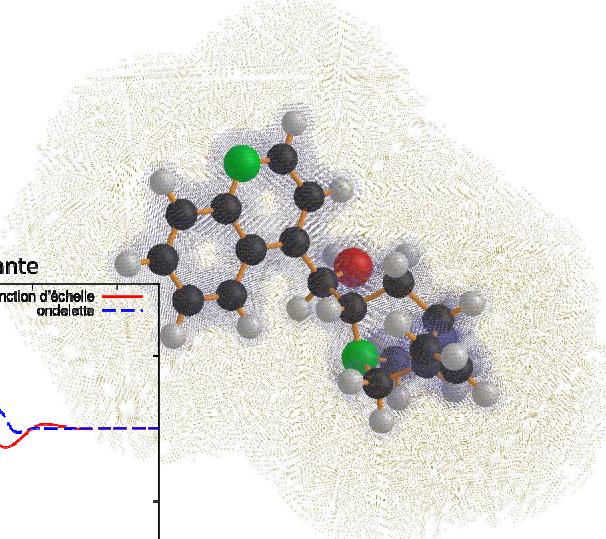
cea

Ondelette Interpolante



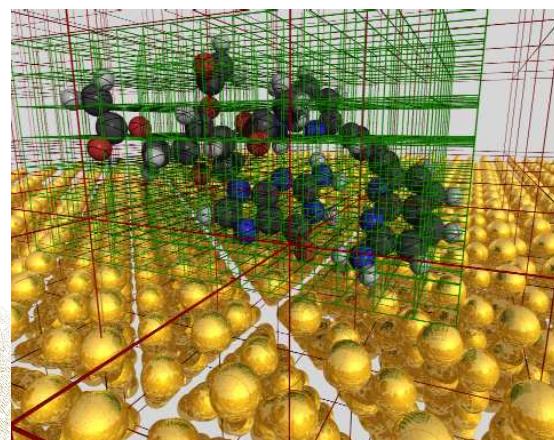
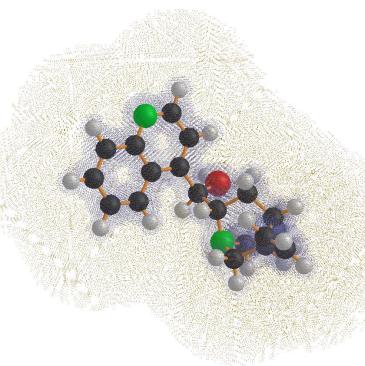
CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

Journées Teratec - 4/6/2008



Maillage adaptatif: raffiner où c'est nécessaire

cea

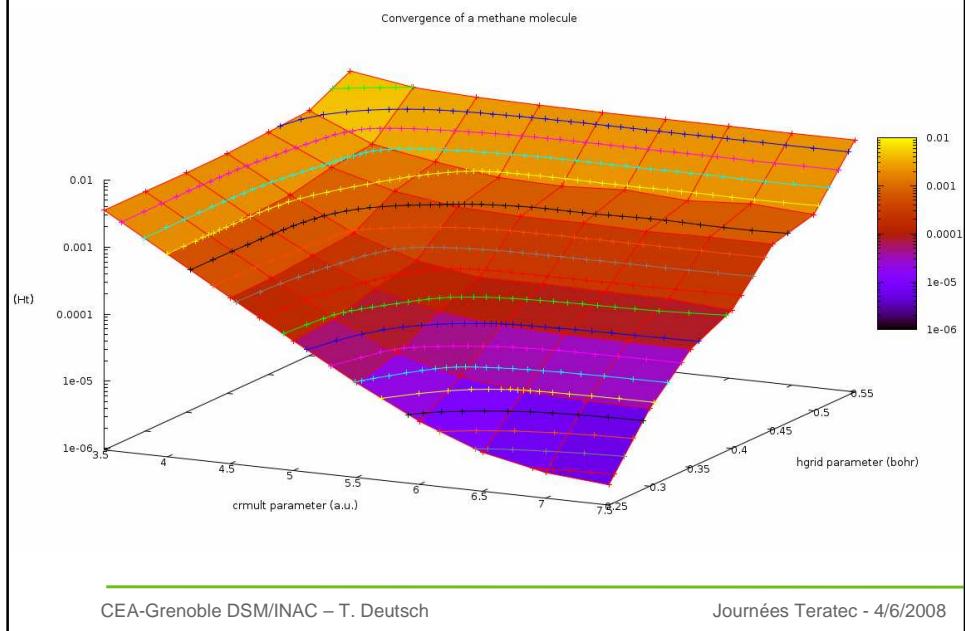


Ajuster automatiquement en fonction des propriétés à étudier (ex: photo-émission)
ou des conditions aux bords (solide, surface, fil, solutions,...)

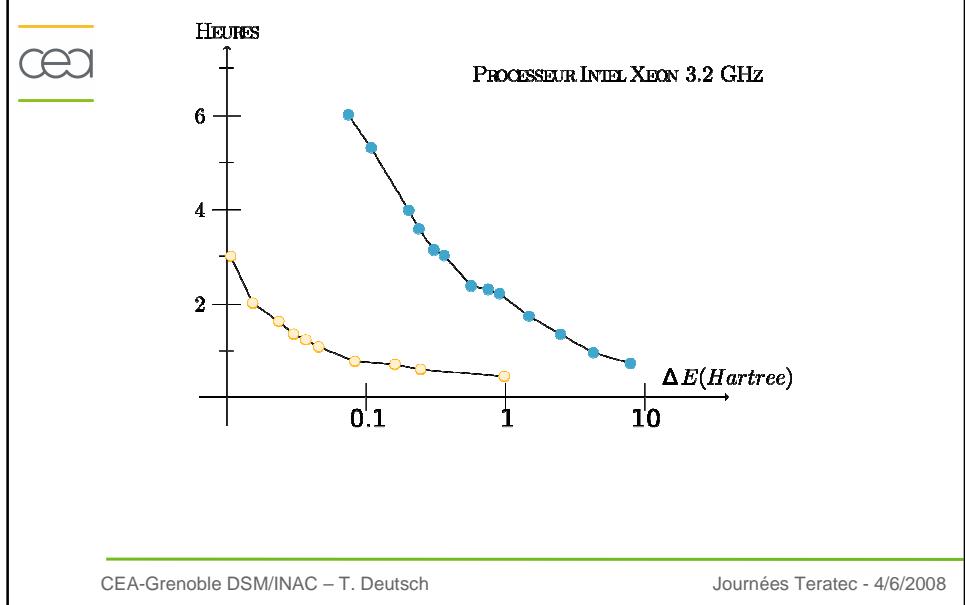
CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

Journées Teratec - 4/6/2008

Ajuster la précision du maillage



Plus efficace que les ondes planes

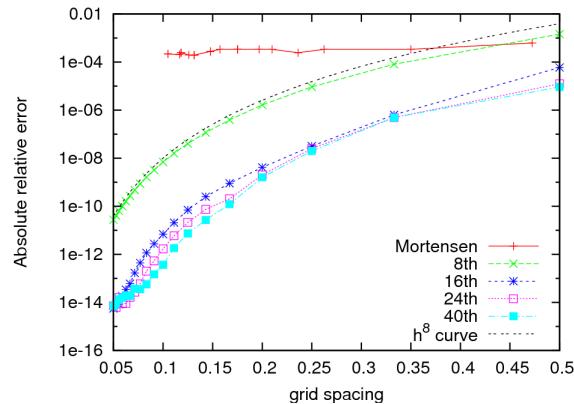


Faits marquants avec les ondelettes

- **Prise en compte de l'électrostatique (effet des charges)**

- Précis et rapide
- Système isolé : J. Chemical Physics 2006
- Surfaces : J. Chemical Physics 2007

cea



CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

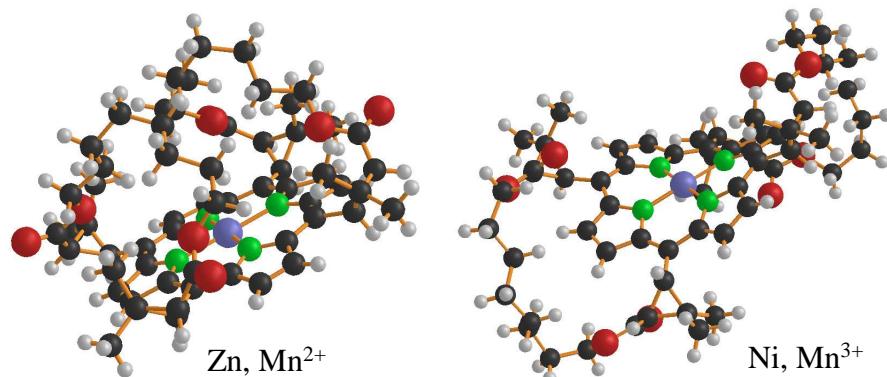
Journées Teratec - 4/6/2008

Faits marquants avec les ondelettes

- **Calcul de systèmes avec une précision inégaleé**

- protéines
- molécules de porphyrine (Zn, Ni, Mn²⁺, Mn³⁺) 145 atomes
deux configurations : fermée ou ouverte (mémoire)

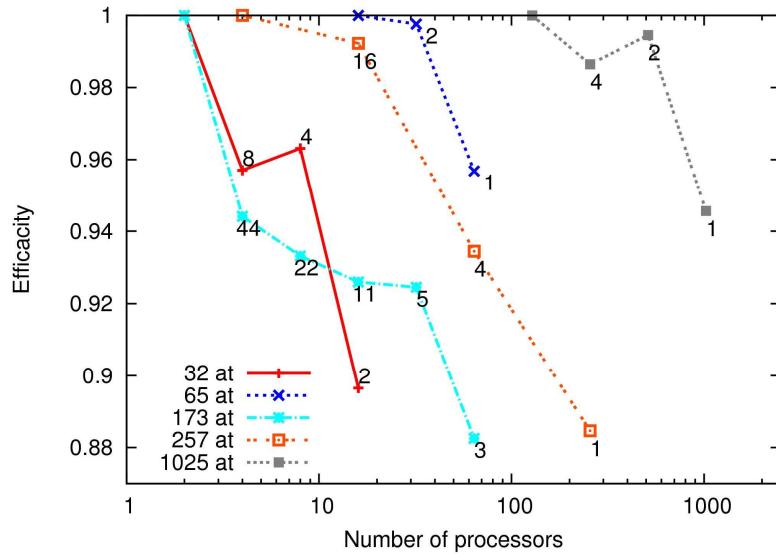
cea



CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

Journées Teratec - 4/6/2008

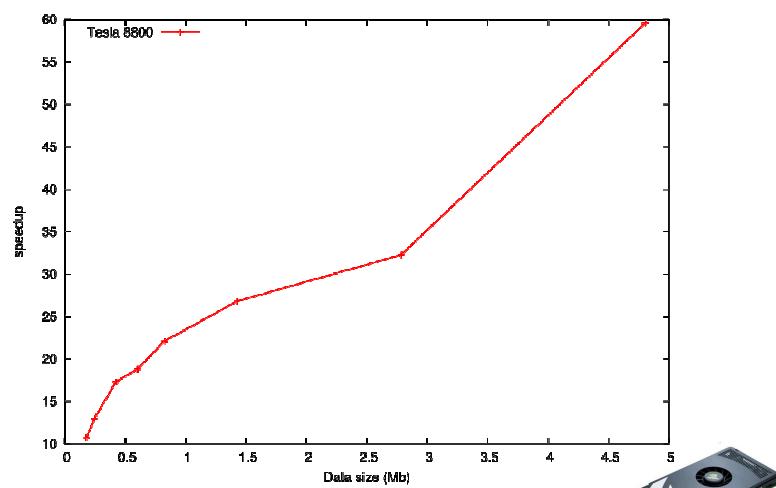
Adapter au calcul massivement parallèle



CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

Journées Teratec - 4/6/2008

Utilisation des architectures hybrides (CPU, GPU)



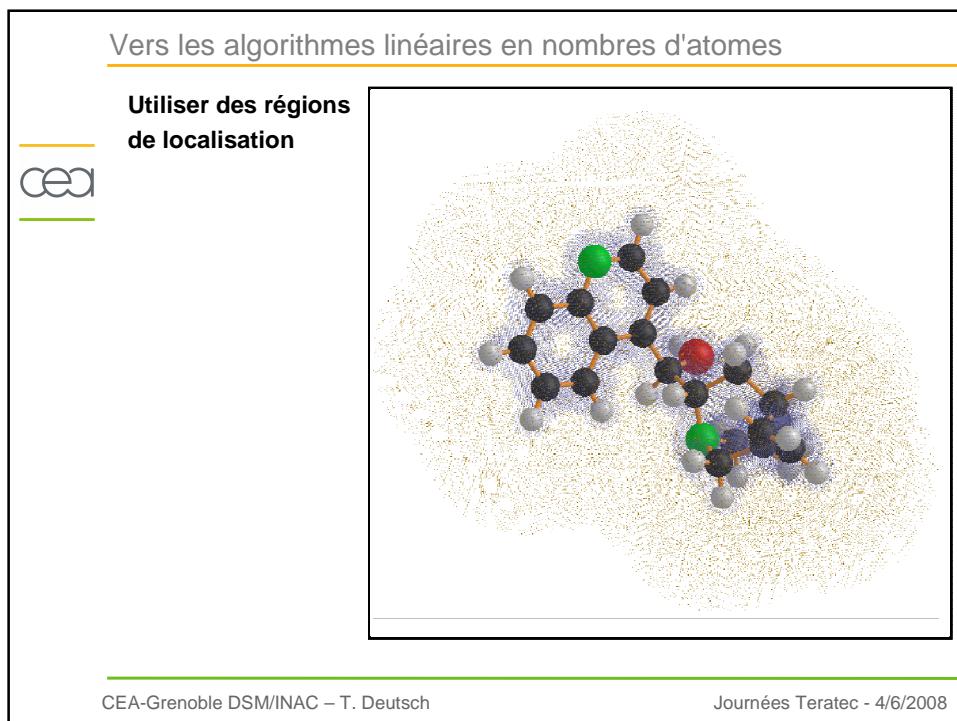
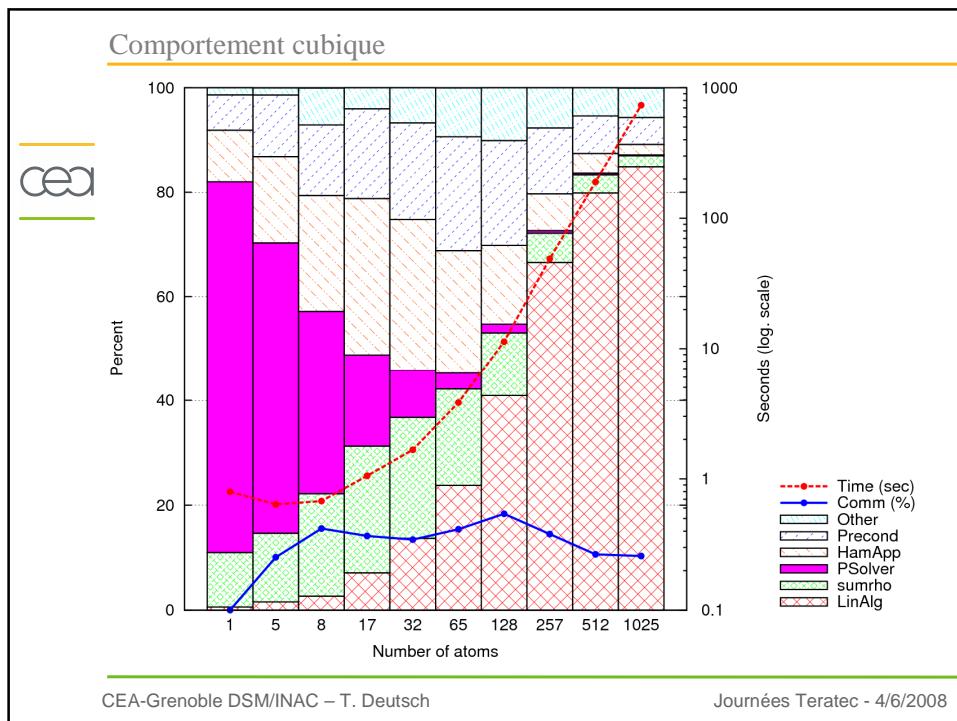
Initiative d'utilisation des cartes graphiques (INRIA) :

- convolutions 3D sur 8800 GTX et Tesla
 - multi-GPU

M. Ospici, L. Genovese, J.F. Méhaut

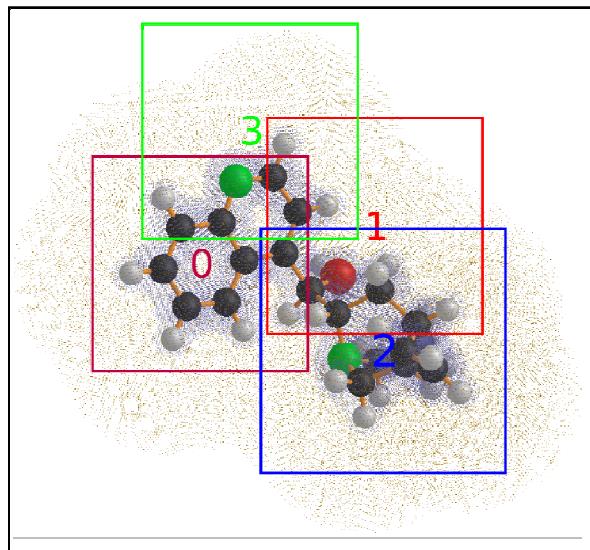
CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

Journées Teratec - 4/6/2008



Vers les algorithmes linéaires en nombres d'atomes

Utiliser des régions de localisation



CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

Journées Teratec - 4/6/2008

Conclusions

Réduction de la dimension caractéristique des nanostructures

+

Développement de méthodes performantes

+

Augmentation des puissances de calcul

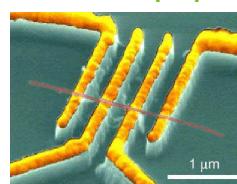
□

Vers une simulation prédictive à l'échelle atomique pour :

Mieux comprendre la physique de ces systèmes (transférabilité)

&

Optimiser leurs propriétés



CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

Journées Teratec - 4/6/2008