

# Méthodes ab initio pour les nanosciences

## L'apport des ondelettes

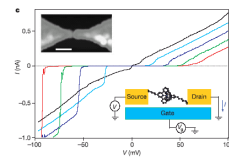
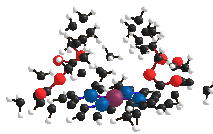
Thierry Deutsch  
CEA Grenoble, DSM/INAC

Nano : objets et technologies

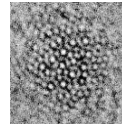
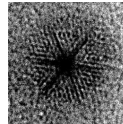
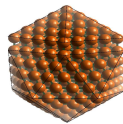
L. Genovese, S. Goedecker, M. Ospici

### Quelques « briques de base » en nanosciences...

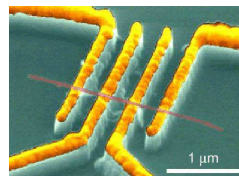
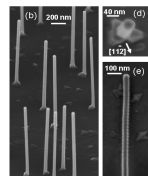
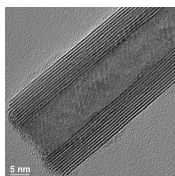
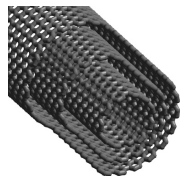
- **Molécules :**



- **Agrégats, nanocristaux :**



- **Nanotubes de carbone, nanofils :**



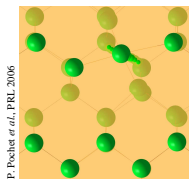
## Les enjeux de la simulation numérique en nanosciences

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

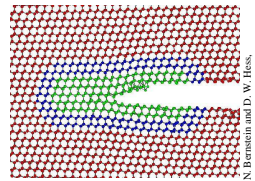


### Deux enjeux :

- 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 ?*

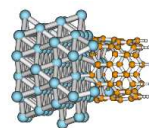
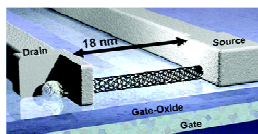
## Les enjeux de la simulation numérique en nanosciences

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]



## Problèmes à résoudre



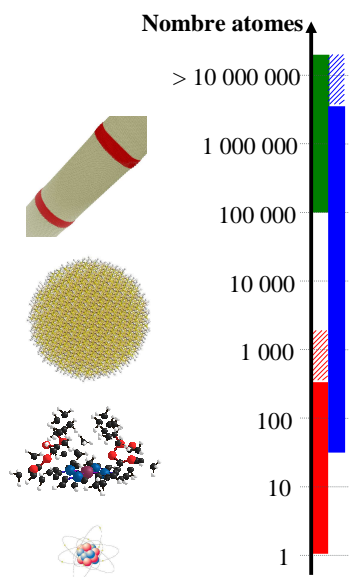
Électronique du futur

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

CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

Journées Teratec - 4/6/2008

## Les moyens de la simulation numérique en nanosciences



### Approches « multi-échelles »

#### Milieux continus (non atomistique)

Exemples : Élasticité continue, masse effective

#### Méthodes « semi-empiriques »

Hamiltoniens simplifiés & paramétrés  
Mécanique classique/quantique

Exemples : Potentiels inter-atomiques (structure)

Liaisons fortes (propriétés électroniques)  
Monte-Carlo (cinétique, statistique)

#### Méthodes « ab initio »

Pas de « paramètres ajustables »  
(≠ « pas d'approximations »)  
Mécanique quantique

Exemple : Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

Journées Teratec - 4/6/2008

## Les méthodes *ab initio*

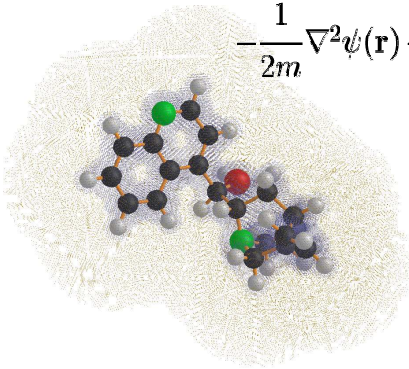
La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)



• 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,  $\psi$ ) par électron

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



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

## 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

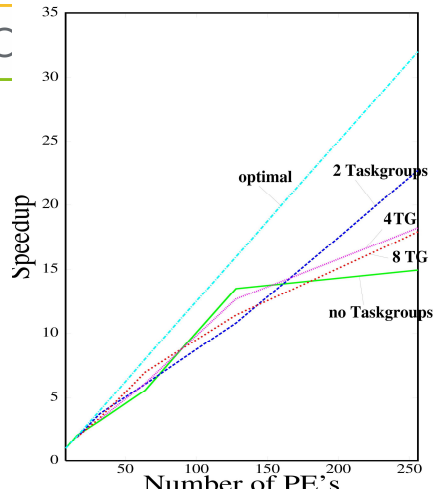
**Nécessité d'une base en espace réel pour**

- Adaptivité du maillage
- Parallélisation massive (accélération)

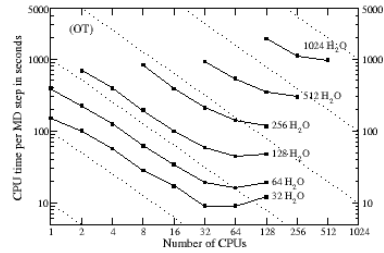
**Meilleure base mathématique (propriété d'échelle)**  
**Les ondelettes**

## Scalabilité des codes

Speedup on T3E for Example with 32 Water Molecules (Reference: 8 PE).



FFT: maximum 100 processeurs dépend fortement du réseau et du processeur



Temps en fonction du nombre de processeurs pour des gaussiennes

## Projet européen BigDFT (FP6-STREP-NEST 511815)

Avoir un code précis et performant, parallèle pour le calcul de la structure électronique de grands systèmes



Fonctions d'échelle : (propriété d'échelle)

$$\phi(x) = \sum_j h_j \phi(2x - j)$$

Ondelettes : différence entre 2 niveaux

$$\phi(2x) = \sum_j \tilde{h}_j \phi(x - j) + \sum_j \tilde{g}_j \psi(x - j)$$

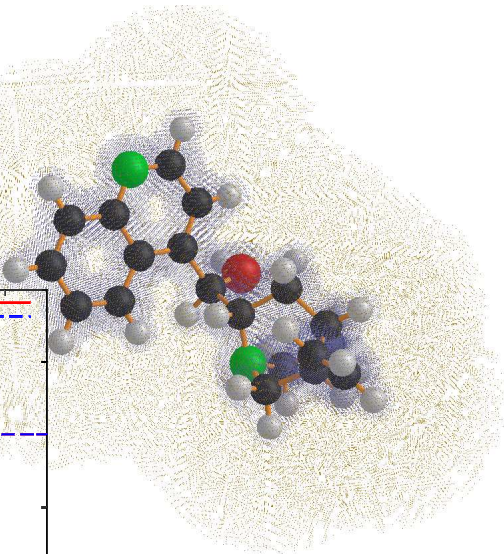
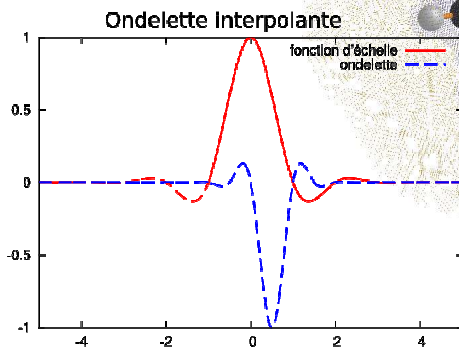
4 partenaires:

- DSM/INAC (coordinateur, physique)
- Université de Bâle (algorithme)
- Université de Louvain (ABINIT)
- Université de Kiel (mathématiques)

+ projet ANR LN3M (approche multi-échelle):

**Concilier des avancées en mathématiques (ondelettes), algorithmiques (calcul parallèle) pour la physique et la chimie**

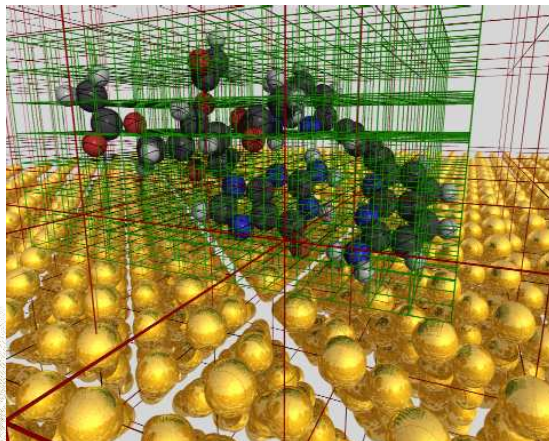
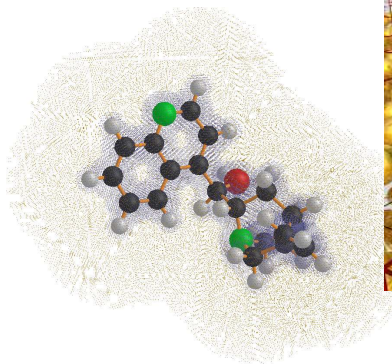
## Adaptativité du maillage



CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

Journées Teratec - 4/6/2008

## Maillage adaptatif: raffiner où c'est nécessaire

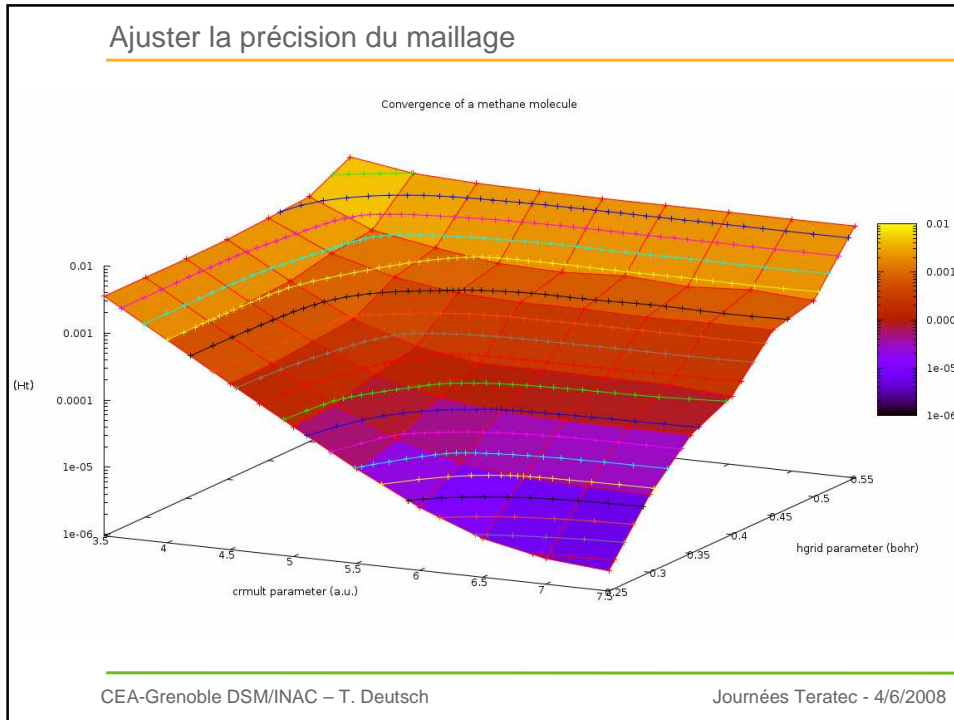


Ajuster automatiquement en fonction des propriétés à étudier (ex: photo-émission)  
ou des conditions aux bords (solide, surface, fil, solutions,...)

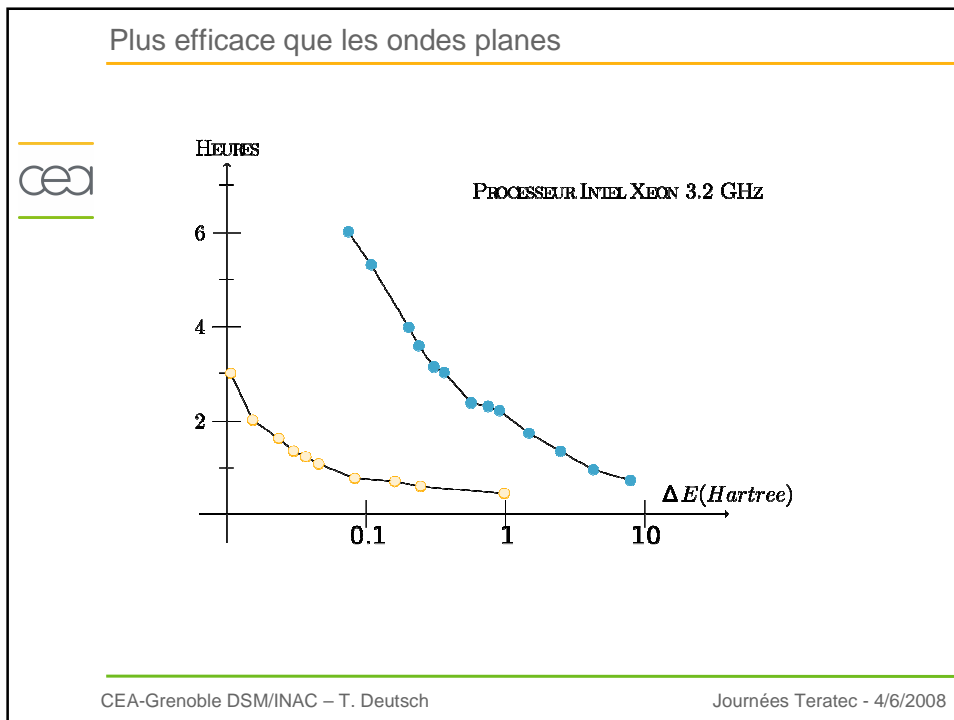
CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

Journées Teratec - 4/6/2008

## Ajuster la précision du maillage



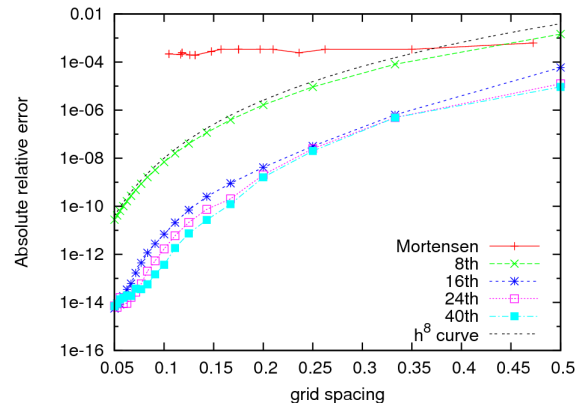
## Plus efficace que les ondes planes



## 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



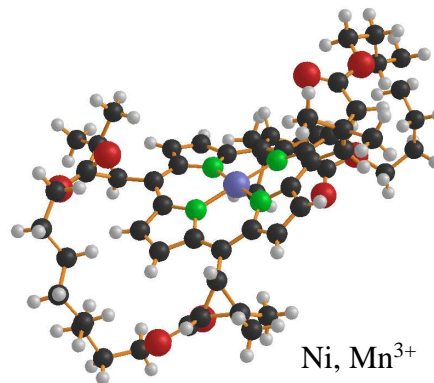
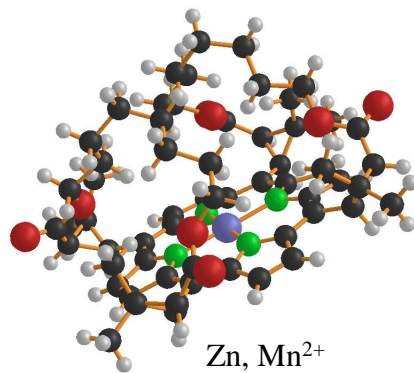
CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

Journées Teratec - 4/6/2008

## Faits marquants avec les ondelettes

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

- protéines
- molécules de porphyrine (Zn, Ni,  $Mn^{2+}$ ,  $Mn^{3+}$ ) 145 atomes  
deux configurations : fermée ou ouverte (mémoire)

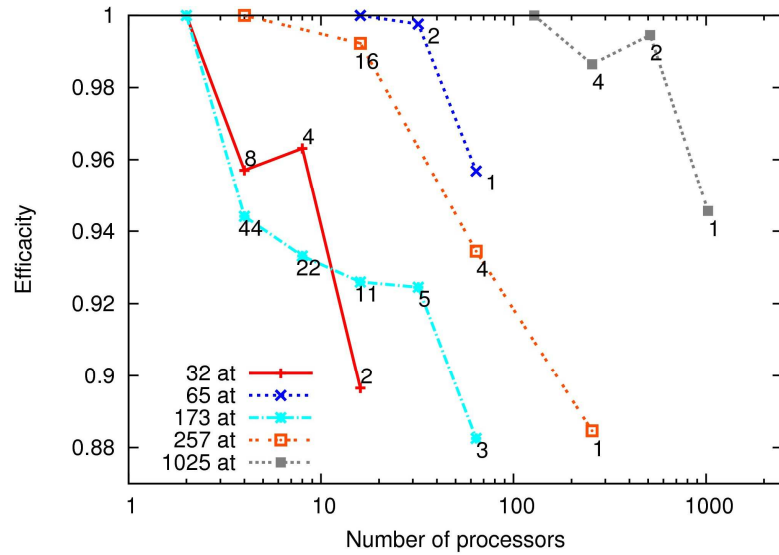


CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

Journées Teratec - 4/6/2008



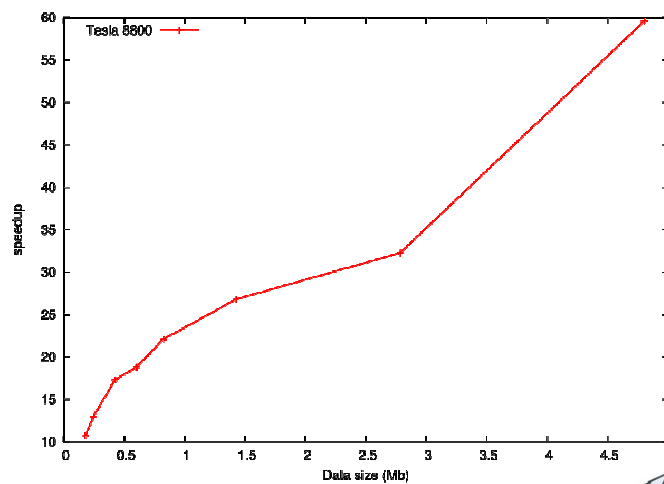
## Adapter au calcul massivement parallèle



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

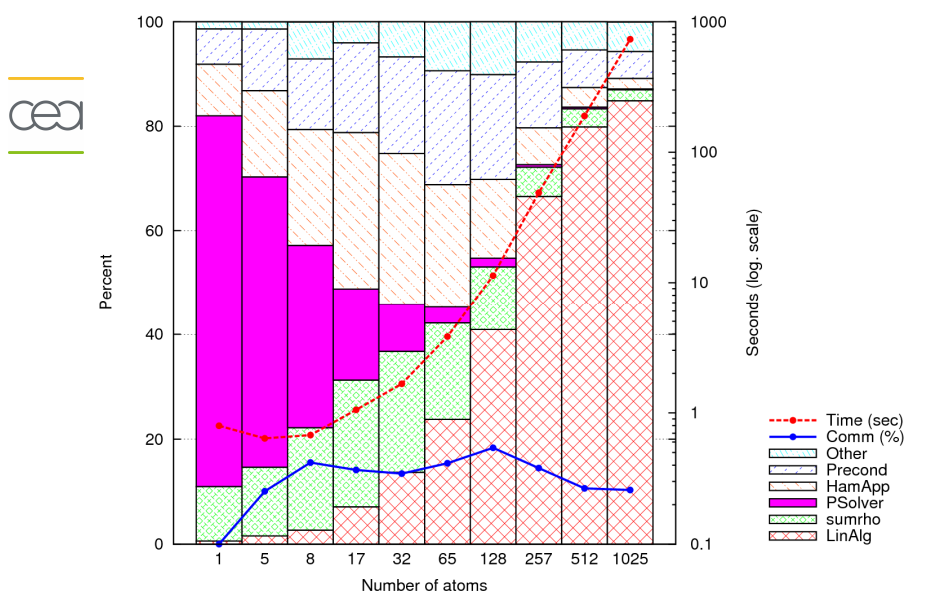


M. Ospici, L. Genovese, J.F. Méhaut

CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

Journées Teratec - 4/6/2008

## Comportement cubique

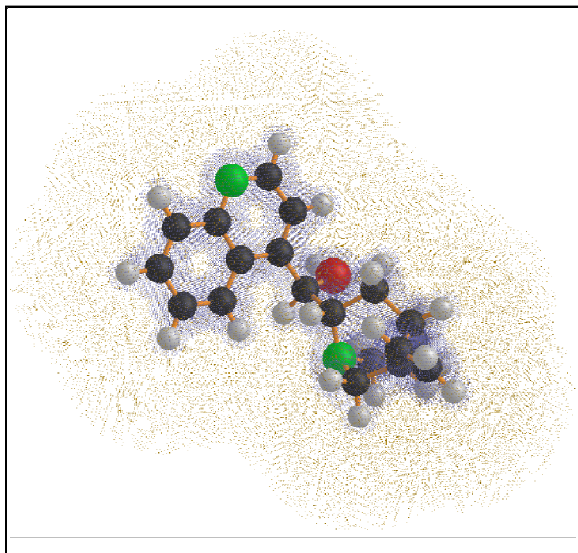


CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

Journées Teratec - 4/6/2008

## Vers les algorithmes linéaires en nombres d'atomes

Utiliser des régions de localisation

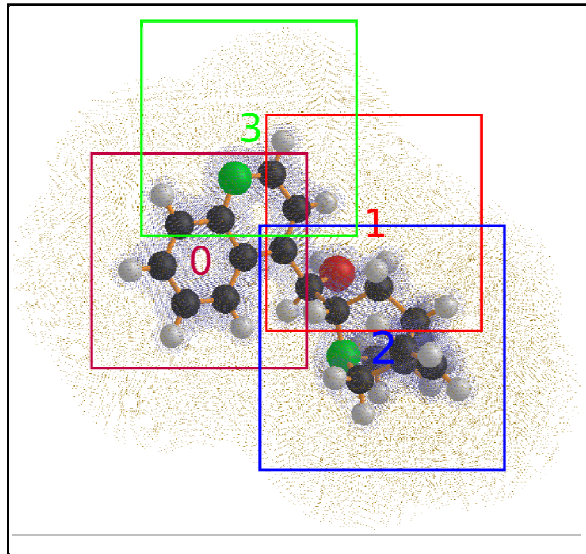


CEA-Grenoble DSM/INAC – T. Deutsch

Journées Teratec - 4/6/2008

## 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

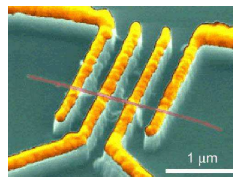
□

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