

explor modéliser
simuler
analyser



**UNIVERSITÉ
DE LORRAINE**

Synthèse des Comptes Rendus des projets actifs pour la période 2022 - 2023

Juin 2024

Sommaire

Avant-propos.....	1
I. Pôle scientifique Agronomie, Agroalimentaire et Forêt (A2F).....	2
I.1. 2018A2FXX0454 : Land surface and climate models to study energy, water and carbon exchanges between the biosphere and the atmosphere.....	3
I.2. 2021A2FXX2267 : Appui à la modélisation en sciences forestières	4
II. Pôle scientifique Automatique, Mathématiques, Informatique et leurs interactions (AM2I).....	5
II.1. 2017AM2IX0186 : Computational Mathematics	6
II.2. 2018AM2IX0877 : Simulation de Monte Carlo et parallélisation	7
II.3. 2020AM2IX2007 : Simulations de Monte Carlo rapide appliquées à la spectroscopie.....	8
III. Pôle scientifique Biologie, Médecine, Santé (BMS)	9
III.1. 2018BMSXX0632 : Étude de la protéine COOT.....	10
III.2. 2020BMSXX2165 : Analyse structurale du domaine TPR1 de la protéine humaine SPAG1 .	11
III.3. 2022BMSXX2616 : Etude par dynamique moléculaire des méga-enzymes PKS	12
IV. Pôle scientifique Chimie et Physique Moléculaire (CPM)	13
IV.1. 2017CPMXX0203 : SEBOMD (SemiEmpirical Born-Oppenheimer Molecular Dynamics) : applications à la dynamique moléculaire de petits peptides et de protéines	14
IV.2. 2017CPMXX0277 : Interactions moléculaires et simulation de systèmes moléculaires en phase condensée.....	15
IV.3. 2018CPMXX0085 : Application du calcul DFT pour l'interprétation des spectres RMN et IR.....	16
IV.4. 2018CPMXX0294 : Structure électronique des matériaux par calcul ab initio.....	17
IV.5. 2018CPMXX0429 : Etude du facteur d'échelle du code crystal sur des mailles a plus de 250 atomes.....	18
IV.6. 2018CPMXX0602 : Effects of Self Aggregation on Perylenes Optical Properties	19
IV.7. 2018CPMXX0851 : Modélisation de la structure et des propriétés vibrationnelles d'hydroxydes doubles lamellaires.....	20
IV.8. 2019CPMXX0886 : Calculs séquentiels rapides en physique et chimie	21
IV.9. 2019CPMXX0918 : Dynamique de réseau des cristaux mixtes semi-conducteurs	22
IV.10. 2019CPMXX0960 : COMETE (Conception in silico de Matériaux pour l'Environnement et l'Energie).....	23
IV.11. 2019CPMXX0983 : Moving Under the Light	24
IV.12. 2019CPMXX0984/2021CPMXX2483 : Etude des interactions à trou sigma.....	25
IV.13. 2020CPMXX2162 : Calcul de la compressibilité dans le CO2 supercritique	26
IV.14. 2022CPMXX2687 : Enumération de conformations de protéines à l'aide d'une approche Branch-and-Prune	27
V. Pôle scientifique Énergie, Mécanique, Procédés, Produits (EMPP)	28
V.1. 2017EMPPX0195 : Computations of the thermoelectric materials	29

V.2. 2017EMPPX0317 : Caractérisation des propriétés thermiques homogènes équivalentes de mousses céramiques solides.....	30
V.3. 2018EMPPX0357 : Etude du mouvement des fumées issues d'un incendie dans un tunnel	31
V.4. 2018EMPPX0394 : Simulation numérique du rayonnement thermique dans des mélanges de gaz de combustion.....	32
V.5. 2018EMPPX0701 : Modélisation cinétique détaillée de réactions thermiques en phase gazeuse.....	33
V.6. 2018EMPPX0815 : Simulation DNS d'écoulements turbulents chargés en particules solides ellipsoïdales.....	34
V.7. 2019EMPPX0898 : RHÉOLOGIE DES POLYMÈRES ET MÉCANIQUE DES COMPOSITES : MODÉLISATION ET CALCULS PAR MÉTHODES FFT.....	35
V.8. 2020EMPPX2055 : Modélisation de la microstructure de polymères.....	36
V.9. 2020EMPPX2068 : Etude par TD-DFT de photosensibilisateurs pour la thérapie photodynamique anti-cancéreuse.....	37
V.10. 2020EMPPX2087 : Modélisation multi-échelle des réservoirs de gaz de charbon.....	38
V.11. 2020EMPPX2217 : Simulation Energie LEMTA.....	39
V.12. 2021EMPPX2491 : Modélisation cinétique détaillée des procédés pour l'énergie et l'environnement.....	40
V.13. 2021EXTXX2356 : Simulation de spectres de photoélectrons de composés oxygénés formés lors de l'oxydation du cyclohexane à basse température.....	41
V.14. 2022EMPPX2596 : Stockage de l'énergie thermique en Mousse Métallique avec matériaux à changement de phases.....	42
V.15. 2022EMPPX2729 : Recherche de solvants verts pour des applications en biotechnologie : Étude par modélisation moléculaire.....	43
V.16. 2022EMPPX2737 : Dynamique des polluants particuliers dans un habitacle automobile....	44
V.17. 2023EMPPX2942 : Simulation de l'ablation thermique d'un solide par un jet liquide.....	45
V.18. 2023EMPPX3020 : Dessalement solaire autonome à faible maintenance destinée à des fins domestiques et agricoles.....	46
VI. Pôle scientifique Matière, Matériaux, Métallurgie, Mécanique (M4).....	47
VI.1. 2017M4XXX0312 : Modélisation mésoscopique de la solidification dendritique.....	48
VI.2. 2017M4XXX0313 : Modélisation multi-échelles des procédés de coulée.....	49
VI.3. 2018M4XXX0108 : Surfaces d'intermétalliques complexes : structure et réactivité.....	50
VI.4. 2018M4XXX0118 : Influence du désordre sur les transitions de phase quantiques.....	51
VI.5. 2018M4XXX0251 : Turbulence de basse fréquence dans les plasmas de fusion.....	52
VI.6. 2018M4XXX0439 : Simulation numérique des procédés d'élaboration métallurgiques.....	53
VI.7. 2018M4XXX0593 : Modélisation ab initio des défauts dans les métaux et alliages Métalliques.....	54
VI.8. 2018M4XXX0708 : Modélisation de diagrammes de diffraction de rayons X réalisés in situ par des méthodes numériques type FFT (Fast Fourier Transform).....	55
VI.9. 2018M4XXX0868 : Etudes des relations structures-propriétés opto-électroniques de nouveaux matériaux organiques pour des applications en photovoltaïque.....	56
VI.10. 2019M4XXX0954 : Simulations à l'aide d'un code FreeFem++ des systèmes film/substrat sphériques soumis à une contraction thermomécanique du cœur.....	57

VI.11. 2019M4XXX0978 : Mechanisms of energy conversion in collisionless plasmas.....	58
VI.12. 2020M4XXX1595 : Étude atomistique des défauts dans les cristaux	59
VI.13. 2021M4XXX2438 : Numerical study of the role of « macrozones » in alpha-beta titanium alloys.....	60
VI.14. 2021M4XXX2481 : Caractérisation discrète à l'échelle atomique de la plasticité aux interfaces dans les alliages complexes légers et transfert vers des modèles de continuum.....	61
VII. Pôle scientifique Observatoire Terre et Environnement de Lorraine (OTELO).....	62
VII.1. 2018OTELO0519 : Modélisation micromécanique de géomatériaux avec des microstructures complexes.....	63
VII.2. 2020OTELO2019 : Simulation de propagation d'ondes sismiques	64
VII.3. 2022OTELO2524 : Simulation moléculaire par méthode monte carlo pour l'étude de comportements thermodynamiques des systèmes contenant SO ₂ et NO à hautes pressions et hautes températures.....	65
VIII. Autres.....	66
VIII.1. 2019EXTXX1184 : Atomistically Guided Alloy Design and Simulation of Microstructure Evolution	67

Avant-propos

Ce document constitue une synthèse détaillée des rapports présentés par les responsables des projets en cours pour la période 2022-2023.

En plus de mettre en lumière les avancées et les résultats obtenus au cours de cette période, il offre un aperçu complet des activités menées au sein des différents projets utilisant les moyens de calcul de haute précision du Mésocentre EXPLOR de l'université de Lorraine.

De plus, il met en évidence les principales publications scientifiques qui ont été réalisées grâce à l'utilisation des précieuses ressources de calcul du Mésocentre EXPLOR. Ces publications témoignent de l'engagement et de l'excellence des chercheurs et contribuent à enrichir le corpus scientifique dans divers domaines de recherche.

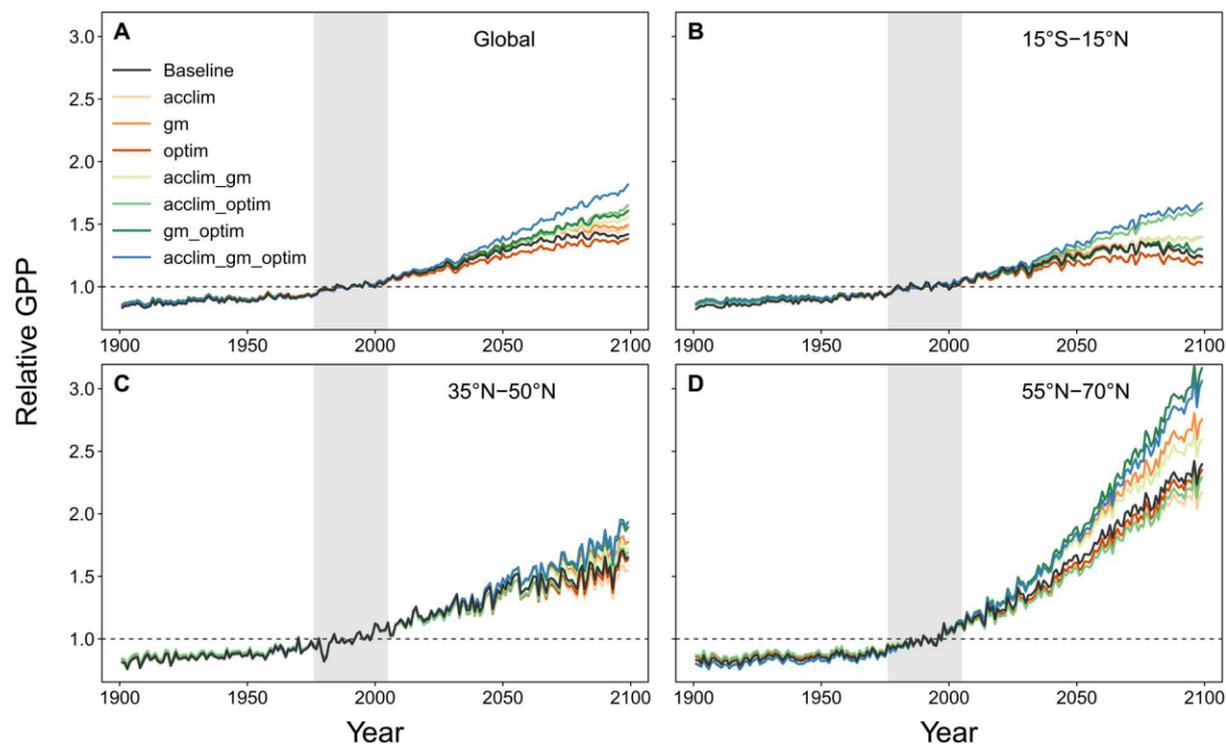
Ce document reflète ainsi l'effervescence et la qualité des travaux menés au sein de notre communauté académique et scientifique de l'université de Lorraine.

**I. Pôle scientifique
Agronomie,
Agroalimentaire et Forêt
(A2F)**

I.1. 2018A2FXX0454 : Land surface and climate models to study energy, water and carbon exchanges between the biosphere and the atmosphere

Responsible : CUNTZ Matthias

Université de Lorraine, AgroParisTech, INRAE, UMR Silva, Nancy



We looked at the responses of the terrestrial biosphere to environmental cues, both in models and in observational data. Plants respond in a variety of ways. We show that plants do not only assimilate more carbon under rising atmospheric CO₂ concentration, but they also produce more biomass, including leaves, which in turn leads to further enhancement of carbon uptake. Putting more flexible representations of plants in global models of the land surface led to non-additive effects. This led to a global carbon sink that could pertain longer under a future hotter and drier climate than land surface models with more restrictive formulations of plant processes.

Publications:

- [1] Knauer J, Cuntz M, Smith B, Canadell JG, Medlyn BE, Bennett AC, Caldararu S, Haverd V (2023) Higher global gross primary productivity under future climate with more advanced representations of photosynthesis, *Science Advances* 9(46), eadh9444, doi: 10.1126/sciadv.adh9444

I.2. 2021A2FXX2267 : Appui à la modélisation en sciences forestières

Responsable : SAINTE-MARIE Julien

Université de Lorraine, AgroParisTech, INRAE, UMR Silva, Nancy

De nombreux modèles de recherche sont développés au sein de l'UMR Silva. Ceux-ci portent sur des champs d'applications variés autour de la thématique des écosystèmes forestiers. Ces modèles peuvent s'intéresser (i) à la croissance et la production de bois des écosystèmes, (ii) aux propriétés et à la qualité des bois, (iii) au fonctionnement écophysiological de l'écosystème forestier, (iv) aux cycles du carbone et des nutriments, (v) à la répartition géographique des essences boisées, ainsi (vi) qu'aux systèmes de production et de transformation de la filière bois et (vii) à leur économie.

Bien qu'abondant des sujets assez variés, l'ensemble de ces modèles font appel à des méthodes numériques classiques telles que l'estimation paramétrique et l'analyse de sensibilité. L'objectif général de ce projet est de proposer des méthodes numériques standardisées aux modélisateurs de l'unité, afin de rendre leur application systématique et d'assurer une expertise robuste des résultats.

**II. Pôle scientifique
Automatique,
Mathématiques,
Informatique et leurs
interactions (AM2I)**

II.1. 2017AM2IX0186 : Computational Mathematics

Responsable : THOME Emmanuel

Laboratoire LORIA, Nancy

Ce projet a été initialement créé sur le thème de la factorisation et du calcul de logarithme discret avec le logiciel CADO-NFS (records établis en 2020). Depuis le début du projet CORE-MATH en 2022 les calculs ont porté plus sur CORE-MATH. L'objectif du projet CORE-MATH est de produire des routines de calcul des fonctions mathématiques usuelles (exp, sin, log, ...) avec arrondi correct, c'est-à-dire les plus précises possible.

Des calculs de pires cas pour CORE-MATH ont été réalisés sur EXPLOR, notamment ceux des fonctions expm1 , exp10 et asin en double précision. Un pire cas est un nombre flottant x dont la valeur de $f(x)$ contient de nombreux bits identiques après le bit d'arrondi. Ces calculs ont été effectués avec le logiciel BaCSeL.

Publications:

- [1] The CORE-MATH Project, Alexei Sibidanov, Paul Zimmermann, Stéphane Gloudu, Proceedings of the 29th IEEE Symposium on Computer Arithmetic (ARITH 2022), 2022.
- [2] Note on FastTwoSum with Directed Roundings, Paul Zimmermann, preprint, 3 pages, 2022
- [3] Towards a correctly-rounded and fast power function in binary64 arithmetic, Tom Hubrecht, Claude-Pierre Jeannerod and Paul Zimmermann, extended version of an article published in the Proceedings of Arith 2023, 2023.

II.2. 2018AM2IX0877 : Simulation de Monte Carlo et parallélisation

Responsable : BLONDEL Walter

CRAN UMR7039 UL-CNRS

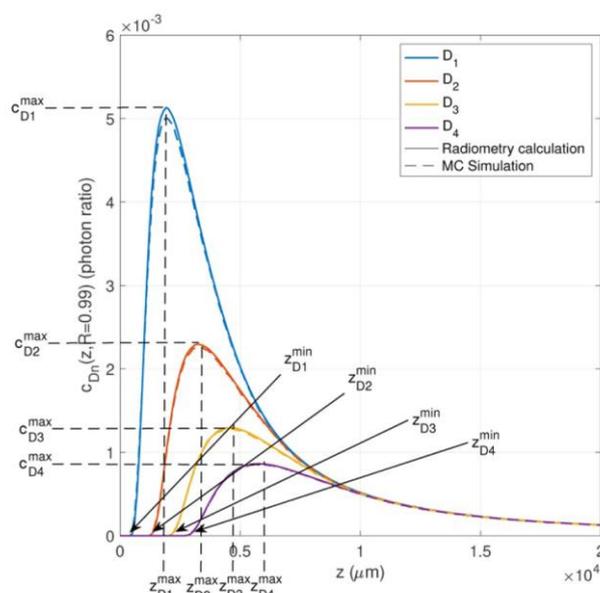


Figure. Courbes des facteurs de correction calculés par méthode photométrique (trait continu) et par méthode de Monte Carlo (trait pointillé) pour les 4 distances sources-détecteurs

Le projet concerne le développement et la mise en œuvre de programmes de simulation accélérée (Monte Carlo Cuda sur cartes GPU) de propagation de photons (UV-Visible-Proche InfraRouge) dans des milieux multicouches turbides (absorbants et diffusants) représentatifs de la peau humaine dans différentes conditions biologiques (saine à cancéreuses).

Publications:

- [1] Colas V., Amouroux M., Perrin-Mozet C., Daul C. and Blondel W. (2023) "Photometric and Monte-Carlo modeling unified approach for the calculation of spatially-resolved correction coefficients linking simulated and experimental diffuse reflectance spectra," *Optics Express*, 31(16), 25954-25969 hal-04170118.
- [2] Colas V., Daul C., Khairallah G., Amouroux M. and Blondel W. (2022) "Improved estimation of the optical properties in a skin five-layer model from spatially resolved diffuse reflectance spectra using a layer-by-layer approach and optimized combinations of wavelengths and source-detector distances," In *SPIE Proceedings, Biomedical applications of light scattering XII*, 11974-21, SPIE Photonics West conference, February 21-27, hal-03560298.
- [3] Colas V., Daul C., Khairallah G., Amouroux M. and Blondel W. (2022) "Theoretical definition and experimental validation of a correction factor to standardize the absolute magnitude of simulated and clinical spatially-resolved diffuse reflectance spectra," In *SPIE Proceedings, Biomedical applications of light scattering XII*, 11974-4, SPIE Photonics West conference, February 21-27, hal-03560273.
- [4] Colas V., Amouroux M., Daul C., Perrin-Mozet C. and Blondel W. (2022) "Comparative study of optical properties estimation on liquid optical phantoms using spatially-resolved diffuse reflectance spectroscopy and double integrating spheres methods," In *SPIE Proceedings, Tissue Optics and Photonics II*, 12147-7, SPIE Photonics Europe, April 3-7, Strasbourg, France hal-03692406.

II.3. 2020AM2IX2007 : Simulations de Monte Carlo rapide appliquées à la spectroscopie

Responsable : BLONDEL Walter

CRAN UMR7039 UL-CNRS

Dans ce projet, nous avons exploité les ressources de calcul parallèle d'EXPLOR pour simuler la propagation de photons dans un milieu multicouches représentatif de la tête humaine (méthode Monte-Carlo maillé) et étudier les distributions de longueurs de parcours des photons détectés ainsi que leurs variations en fonction des caractéristiques anatomiques et des propriétés optiques des couches de tissus biologiques.

Publications:

Il n'y a pas eu de publication sur la période d'activité visée par nécessité de non-divulgateion d'informations confidentielles et/ou liées à des demandes de brevet en cours.

**III. Pôle scientifique
Biologie, Médecine, Santé
(BMS)**

III.1. 2018BMSXX0632 : Étude de la protéine COOT

Responsable : CHAGOT Benjamin

Laboratoire IMoPA

Le projet porte sur l'étude de la protéine CooT impliquée dans la maturation du cluster Ni-Fe-S des CO déshydrogénases. Les CooT sont des petites protéines de 7kDa qui sont capables de dimériser et de fixer un ion Ni²⁺ par dimère avec une très forte affinité (Kd < 10 nM ; un deuxième site de fixation du Ni²⁺ existe mais le Kd est de l'ordre de 0,2 µM), plus de 100 homologues de CooT ont été identifiés chez les procaryotes. La structure déterminée en absence de nickel par cristallographie montre que les CooT sont constitués d'un sandwich beta de 3 et 4 brins. Des expériences de mutagenèse, de calorimétrie et de dichroïsme circulaire ont permis de proposer que la cystéine 2 de chaque monomère soit impliquée dans la chélation du nickel (E39 et H41 seraient impliqués dans le deuxième site de fixation). Aucune structure liée aux ions Ni²⁺ n'a encore été déterminée mais un grand changement conformationnel suite à la liaison au nickel est proposé.

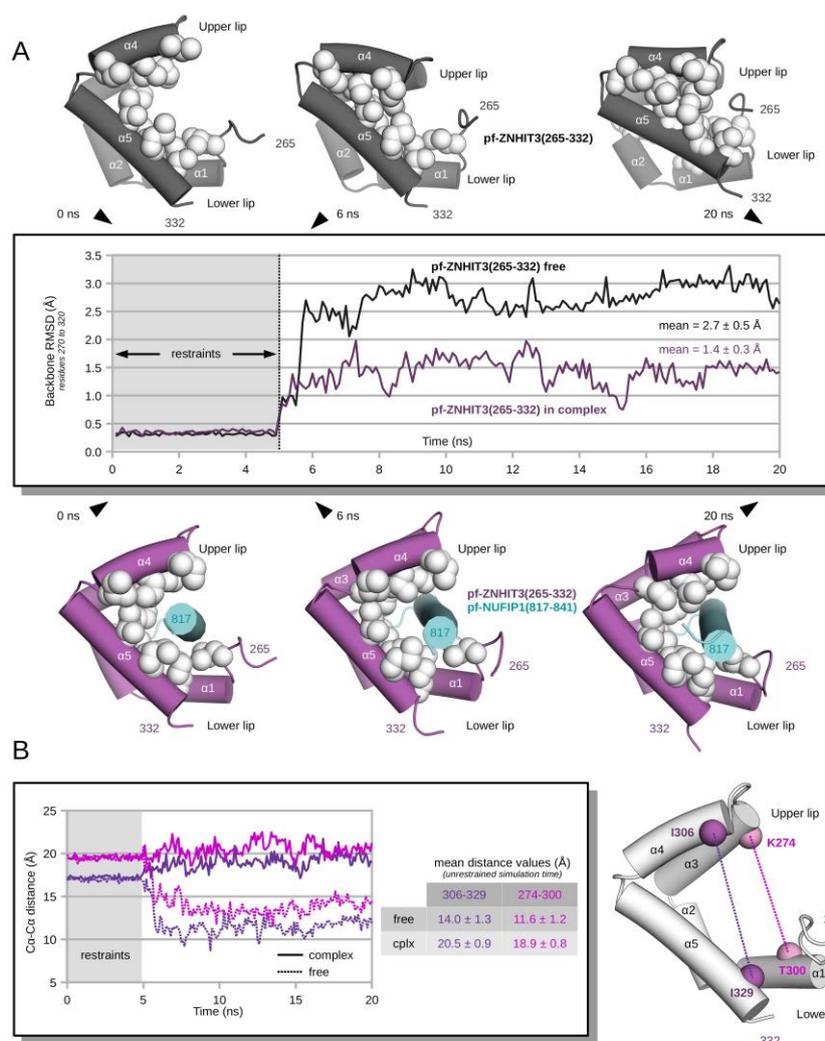
Publications:

Analyse des données en cours.

III.2. 2020BMSXX2165 : Analyse structurale du domaine TPR1 de la protéine humaine SPAG1

Responsable : QUINTERNET Marc

Laboratoire IBSLor, Nancy



La ressource logiciel principale utilisée a été namd2. Ce logiciel permet la simulation de la dynamique moléculaire de protéines. Namd2 a été utilisé uniquement dans sa version GPU. Namd2 a été utilisé pour une douzaine de protéines, pour lesquelles la durée moyenne de simulation était d'environ 100 ns (durant environ 24 heures).

Publications:

- [1] Structural Analysis of the Plasmodial Proteins ZNHIT3 and NUFIP1 Provides Insights into the Selectivity of a Conserved Interaction. Chagot ME, Boutilliat A, Kriznik A, Quinternet M. *Biochemistry*. 2022, 61 (7):479-493.

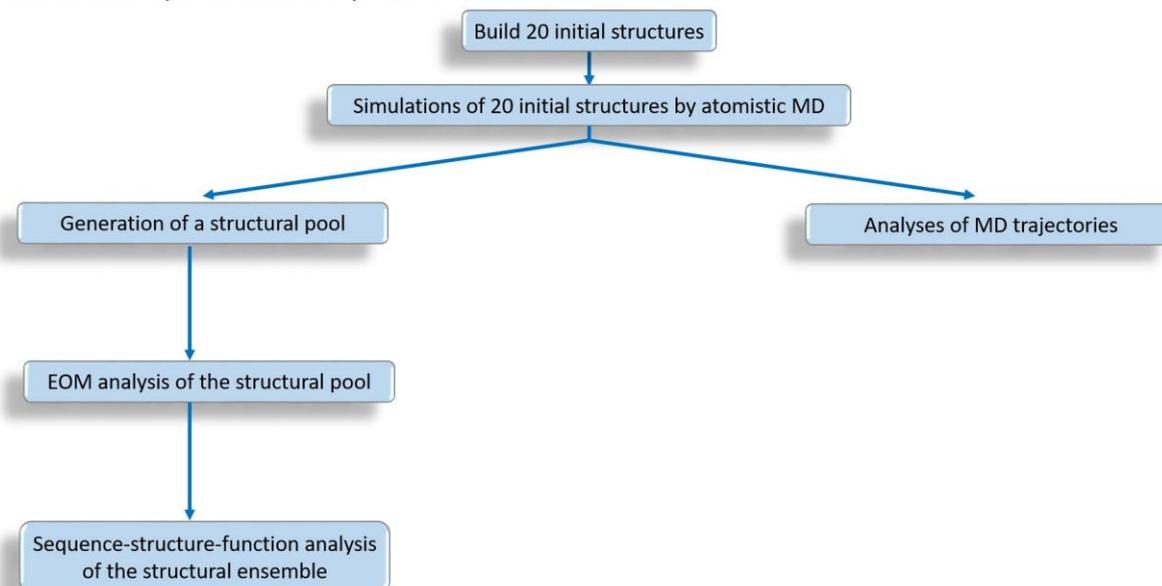
III.3. 2022BMSXX2616 : Etude par dynamique moléculaire des méga-enzymes PKS

Responsable : PAURON Lynn

Laboratoire IMOPA, Nancy

WORKFLOW

Identification of protein conformers present in solution



Ce projet porte sur l'étude par dynamique moléculaire de deux systèmes biologiques distincts : A) les membranes synaptiques et B) des protéines de très grande taille appelées « PKS ». L'objectif global de la responsable scientifique est d'établir des méthodes de simulations par dynamique moléculaire atomistique et gros-grain de systèmes biologiques pour que son expertise en dynamique moléculaire soient disponibles aux projets de l'équipe S2BEAM.

Publications:

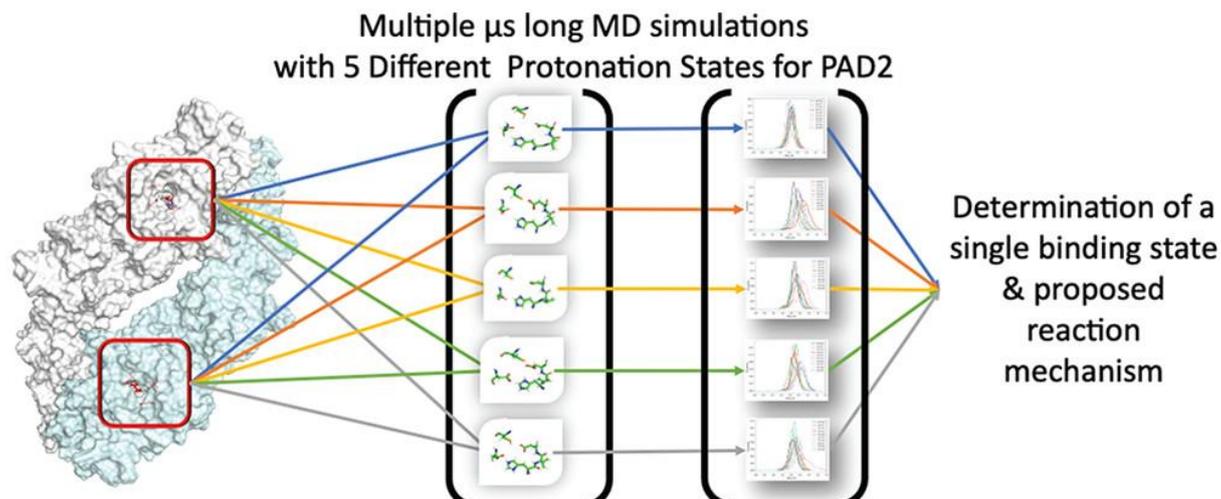
Analyse des données en cours.

IV. Pôle scientifique Chimie et Physique Moléculaire (CPM)

IV.1. 2017CPMXX0203 : SEBOMD (SemiEmpirical Born-Oppenheimer Molecular Dynamics) : applications à la dynamique moléculaire de petits peptides et de protéines

Responsable : MONARD Gerard

Laboratoire LPCT, Vandœuvre-lès-Nancy



Les ressources de calcul d'EXPLOR nous permettent de travailler sur plusieurs projets simultanément autour de la modélisation de la structure et de la réactivité des protéines. Nous participons activement au développement du logiciel AMBER spécialisé dans la modélisation de systèmes biomoléculaires. A travers l'utilisation de nombreux containers, nous contribuons à tester et à débogger le code source pour une multitude de différentes plateformes. D'un point de vue applicatif, nous collaborons avec différents groupes en France et dans le monde autour de sujet d'intérêts biologiques.

La plate-forme EXPLOR nous a permis ainsi de travailler sur des sujets divers comme la reconnaissance de ligands par la Protéine Arginine Déiminase 2, les pKas de dérivés de Thiazol-2-imine, ou l'élucidation de spectres RMN de dérivés de benzylidenethiazolidine-2,4-dione (BTZD) par DFT.

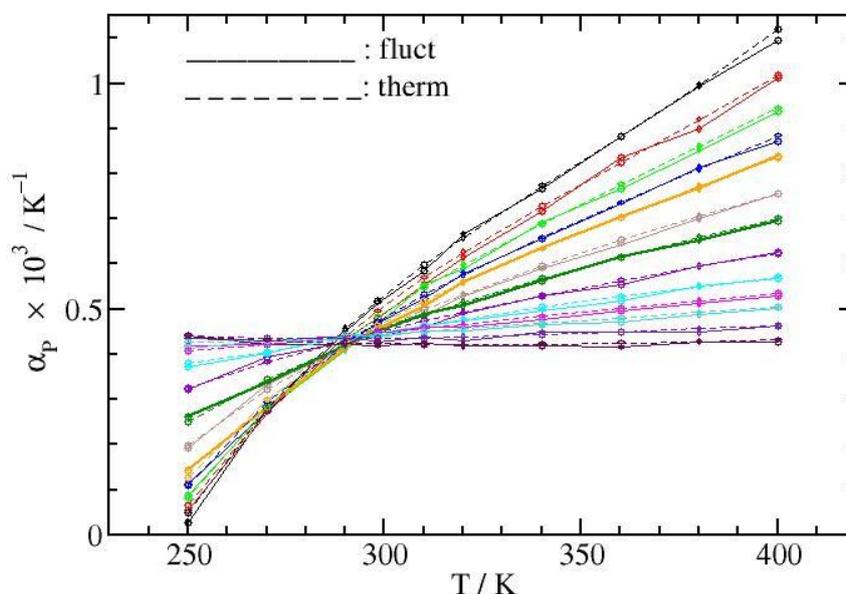
Publications:

- [1] Evrim Arslan, Zeynep Pinar Haslak, Gérald Monard, Ilknur Dogan, and Viktorya Aviyente. Quantum mechanical prediction of dissociation constants for thiazol-2-imine derivatives. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 63(10) :2992–3004, 2023.
- [2] D.A. Case, H.M. Aktulga, K. Belfon, et al. AMBER. University of California, San Francisco, 2020.
- [3] Erdem Cicek, Gerald Monard, and Fethiye Aylin Sungur. Molecular mechanism of protein arginine deiminase 2 : A study involving multiple microsecond long molecular dynamics simulations. *Biochemistry*, 61(13) :1286–1297, 2022.
- [4] Dorian Dupommier, Michel Boisbrun, Gerald Monard, and Corinne Comoy. Unexplored vinylsubstituted 5-benzylidenethiazolidine-2, 4-diones : Synthesis and dft/nmr stereochemical assignment. *The Journal of Organic Chemistry*, 88(6) :3724–3739, 2023.
- [5] Antoine Marion, Hatice Gokcan, and Gerald Monard. Semi-empirical born-oppenheimer molecular dynamics (sebomd) within the amber biomolecular package. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 59(1) :206–214, 2019. PMID : 30433776.

IV.2. 2017CPMXX0277 : Interactions moléculaires et simulation de systèmes moléculaires en phase condensée

Responsable : MILLOT Claude

Laboratoire LPCT, Vandœuvre-lès-Nancy



Ce projet concerne la modélisation de systèmes moléculaires (hors systèmes biologiques) et vise à l'étude de la solvation et des propriétés structurales, thermodynamiques, dynamiques, diélectriques. La technique de simulation utilisée est essentiellement la Dynamique Moléculaire (codes maison ou commerciaux comme Amber et Lammmps) mais des simulations de type Monte Carlo pourraient aussi être envisagées. La qualité des simulations statistiques de phases condensées est intimement liée à la précision des champs de force utilisés.

Un volet du projet est le calcul de propriétés moléculaires par la chimie quantique pour affiner des champs de force existants ou paramétriser un nouveau champ de force pour un système particulier.

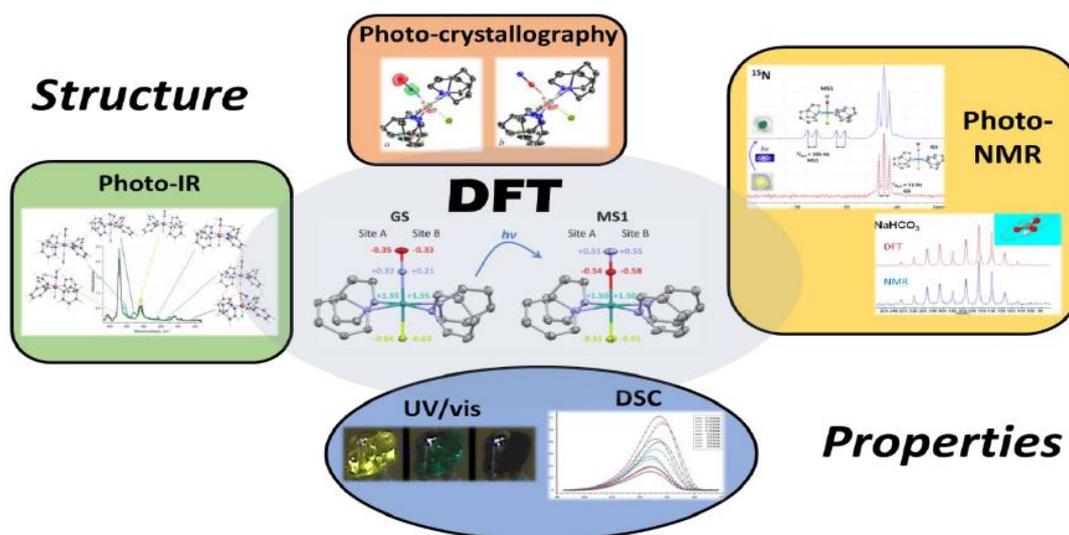
Publications:

- [1] Thermophysical properties of chloropropanes in liquid phase: experiments and simulations. B. Jasiok, M. Chorazewski, A. Pribylov, E.B. Postnikov, P. Friant-Michel, C. Millot, *J. Mol. Liq.*, 358, 119137 (2022).
- [2] Thermophysical properties of the SPC/E model of water between 250 and 400 K at pressures up to 1000MPa. B. Jasiok, A. Pribylov, E.B. Postnikov, P. Friant-Michel, C. Millot, submitted to *Fluid Phase Equilibria*.
- [3] Effect of apolar solvent and hydratation on the aggregation of the chlorophyll a : A DFT B3LYP-D3/6-31G(d) study with the SMD and IEFPCM continuum solvent models. A. Mahmoudi, A. Ben Fredj, G. Monard, C. Millot, in preparation
- [4] Molecular Dynamics of molecular liquids in the presence of a rotating electric field. R. Martin, A. Carof, C. Millot, in preparation

IV.3. 2018CPMXX0085 : Application du calcul DFT pour l'interprétation des spectres RMN et IR

Responsable : GANSMÜLLER Axel

Laboratoire CRM2 (UMR 7036), équipe de méthodologie RMN, Vandœuvre-lès-Nancy



L'objectif du projet est la caractérisation structurale et dynamique de matériaux fonctionnels pour lier la structure moléculaire aux propriétés macroscopiques. Les observables mesurées par spectroscopies de Résonance Magnétique Nucléaire, Résonance Quadrupolaire Nucléaire, et Infra Rouge, dépendent directement de l'environnement local des atomes. Il est ainsi important de pouvoir les simuler à partir de modèles structuraux afin de faciliter leur interprétation. Les programmes de calcul DFT permettent d'établir ces modèles grâce aux modules d'optimisation géométrique, mais également de calculer les observables mesurables par les différentes techniques spectroscopiques (tenseur de déplacement chimique, tenseur de gradient de champs électrique, couplages dipolaires et scalaires) et de simuler les spectres correspondants.

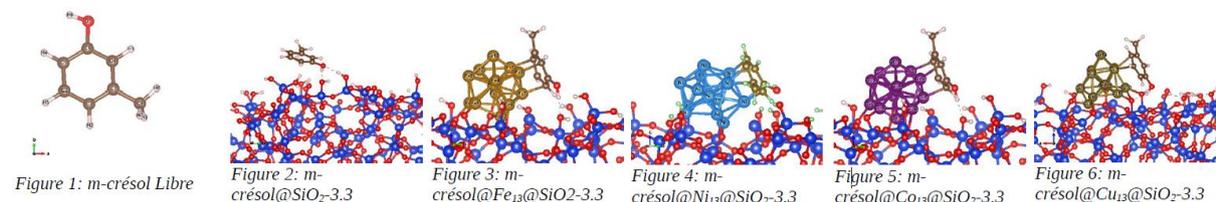
Publications:

- [1] Gansmüller, A.; Mikhailov, A. A.; Kostin, G. A.; Raya, J.; Palin, C.; Woike, T.; Schaniel, D. Solid-State Photo-NMR Study on Light-Induced Nitrosyl Linkage Isomers Uncovers Their Structural, Electronic, and Diamagnetic Nature. *Anal. Chem.* 2022, 94 (10), 4474–4483. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.1c05564>.
- [2] Mikhailov, A. A.; Woike, T.; Gansmüller, A.; Schaniel, D.; Kostin, G. A. Photoinduced Linkage Isomers in a Model Ruthenium Nitrosyl Complex: Identification and Assignment of Vibrational Modes. *Spectrochim. Acta. A. Mol. Biomol. Spectrosc.* 2021, 263, 120217. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2021.120217>.

IV.4. 2018CPMXX0294 : Structure électronique des matériaux par calcul ab initio

Responsable : LEBEGUE Sébastien

Laboratoire LPCT, Vandœuvre-lès-Nancy



Dans cette étude, nous avons utilisé la méthode DFT avec VASP pour modéliser les interactions électroniques, en incluant les interactions de van der Waals avec l'approximation de Grimme (D2). Une correction GGA/PBE+U a été appliquée pour tenir compte du comportement complexe des états 3d dans les clusters de métaux de transition. Nous avons utilisé un substrat de silice SiO₂-3.3, préparé par déshydroxylation contrôlée, et examiné différents modes de greffage de clusters de métaux de transition, montrant leur stabilité énergétique. Les clusters de métaux de transition, tels que Fe₁₃, Co₁₃, Ni₁₃ et Cu₁₃ présentent une symétrie D_{3d}, connue pour leur stabilité structurale. Nous avons examiné les interactions les plus stables entre les molécules (m-Cresol, CO, CO₂, H₂O) et les surfaces de silice, qu'elles soient pures ou supportées. Sur la silice pure, nous avons étudié cinq sites d'interaction distincts, tandis que sur les surfaces de silice supportées, nous avons évalué l'adhérence des molécules au sommet du cluster ou à l'interface cluster@surface. Pour chaque type d'interaction, nous avons exploré diverses orientations et positions moléculaires pour comprendre ces processus.

Publications:

- [1] Experimental and ab initio investigation on the effect of CO and CO₂ during hydrodeoxygenation of m-cresol over Co/SBA-15. C. A. Tales, S. Gueddida, et al., *Chem. Cat. Chem.* (2023) e202201327.
- [2] First principles study of the structural and electronic properties of tetragonal ZrOX (X = S, Se, Te) monolayers and their vdW heterostructures for applications in optoelectronics and photocatalysis. I. Said, S. Gueddida, M. Barhoumi, M. Said, and S. Lebègue, *J. Chem. Phys.* (2023) 158, 094708.
- [3] First Principles modeling of the adsorption mechanism of carboxylic and phosphonic acids onto pristine and defective delafossite CuAlO₂ surfaces. M. Y. Fatihi, S. Gueddida, et al., *physica status solidi (b)* (2023) 2200611.
- [4] Unravelling the critical role of silanol in Pt/SiO₂ for room temperature HCHO oxidation: an experimental and DFT study. S. Chen, S. Gueddida, et al., *Applied Catalysis B – Environmental* (2023) 122672.
- [5] Binuclear spin-crossover [Fe(bt)(NCS)₂]₂(bpm) complex: a study using first principles calculations. K. Lazaar, F. Aouaini, S. Gueddida, *J. Chem. Phys.* 158, 144307 (2023).
- [6] Tuning the electronic and optical properties of small organic acenedithiophene molecular crystals for photovoltaic applications: First principles calculations. K. Lazaar, S. Gueddida, M. Said, S. Lebègue, *J. Chem. Phys.* 159, 194304 (2023).
- [7] Band gap, Jahn-Teller deformation, octahedra rotation in transition metal perovskites LaTiO₃. F. Pascale, S. Gueddida, K. Doll and R. Dovesi, *Journal of Computational Chemistry* (2023).

IV.5. 2018CPMXX0429 : Etude du facteur d'échelle du code crystal sur des mailles a plus de 250 atomes

Responsable : PASCALE Fabien

Laboratoire LEMTA, Vandœuvre-lès-Nancy

J'utilise principalement des outils de simulation ab-initio, en particulier le code CRYSTAL (dont je suis développeur), pour étudier les propriétés physiques de la matière pour des systèmes périodiques ou non-périodiques. Je travaille principalement sur l'étude des transitions de phase dans les pérovskites et des propriétés magnétiques en m'aidant du calcul de la dispersion des phonons. Les propriétés physiques calculées sont comparables aux données expérimentales : gap optique, Spectre IR et Raman, split LO-TO, caractérisation des matériaux grâce, constante de couplage magnétique. Le centre de calcul EXPLOR m'a permis de trouver des résultats partiels qui ont donné lieu à la publication de 12 articles scientifiques sur la période concernée, listés dans la dernière partie de ce rapport. Ces ressources informatiques me sont utiles pour travailler sur les mélanges (solution solide souvent associé à des systèmes de grande dimension) et sur les systèmes contenant peu de symétrie.

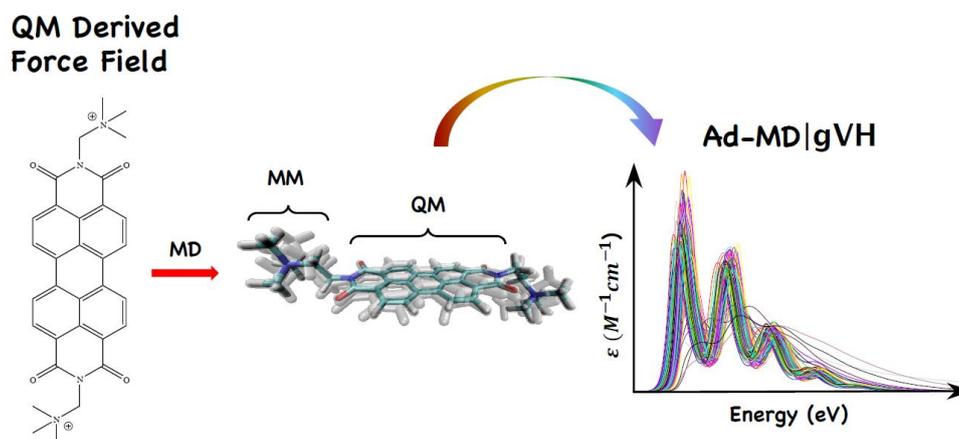
Publications:

- [1] Alexander PLATONENKO et al. "The effect of charge and spin state on the Infrared spectra and hyperfine coupling constants of point defects in Silicon". In : *Physica B: Condensed Matter* 626 (fév. 2022), p. 413499.
- [2] Khaled E EL-KELANY et al. "Quantum mechanical simulation of various phases of KVF3 perovskite". In : *Journal of Physics: Condensed Matter* 34.28 (mai 2022), p. 285401.
- [3] Basile HERZOG et al. "Assessing the Accuracy of Machine Learning Thermodynamic Perturbation Theory: Density Functional Theory and Beyond". In : *Journal of Chemical Theory and Computation* 18.3 (fév. 2022), p. 1382-1394.
- [4] Fabien PASCALE et al. "The role of spin density for understanding the superexchange mechanism in transition metal ionic compounds. The case of KMF3 (M = Mn, Fe, Co, Ni, Cu) perovskites". In : *Physical Chemistry Chemical Physics* 24.21 (2022), p. 12950-12960.
- [5] Koussai LAZAAR et al. "First Principles Calculations of Getchellite AsSbS3 in Bulk and Monolayer Structures". In : *physica status solidi (b)* 260.3 (jan. 2023), p. 2200592.
- [6] Fabien PASCALE et al. "The d Orbital Multi Pattern Occupancy in a Partially Filled d Shell: The KFeF3 Perovskite as a Test Case". In : *Materials* 16.4 (fév. 2023), p. 1532.
- [7] Fabien PASCALE et al. "How deeply are core electrons perturbed when valence electrons are spin polarized? The case study of transition metal compounds". In : *Journal of Computational Chemistry* 44.2 (oct. 2022), p. 65-75.
- [8] Fabien PASCALE et al. "The role of the A monovalent cation in the AVF3 perovskite series. A quantum mechanical investigation". In : *Physical Chemistry Chemical Physics* 25.18 (2023), p. 12961-12973.
- [9] Neveen I. ATALLAH et al. "Extraordinary piezoelectric effect induced in two-dimensional rare earth monochalcogenides via reducing system dimensionality". In : *Journal of Materiomics* 9.1 (jan. 2023), p. 72-81.
- [10] Simon B. HENGEVELD et al. "A Study on the Covalent Geometry of Proteins and Its Impact on Distance Geometry". In : *Geometric Science of Information*. Sous la dir. de Frank NIELSEN et Frédéric BARBARESCO. Cham : Springer Nature Switzerland, 2023, p. 520-530.

IV.6. 2018CPMXX0602 : Effects of Self Aggregation on Perylenes Optical Properties

Responsable : PASTORE Mariachiara

Laboratoire LPCT, Vandœuvre-lès-Nancy



Un des plus grands défis pour la communauté scientifique en ce moment est la transition vers les énergies vertes, telles que les technologies d'énergie solaire, capables de répondre à l'urgence climatique et à la demande croissante en énergie d'une population grandissante dans le monde ; ce qui, en fait, a été très limité en raison de leur performance de base. Notamment, la théorie s'est avérée très utile pour améliorer l'efficacité de ces dispositifs en accédant aux différents phénomènes physiques sous-jacents à leur fonctionnement. Dans ce contexte, nous avons réalisé la modélisation des composants les plus importants dans ce type de technologies, tels que les colorants sensibilisateurs ou les interfaces avec les semi-conducteurs, en utilisant des calculs ab initio et de simulations de Dynamique Moléculaire (MD).

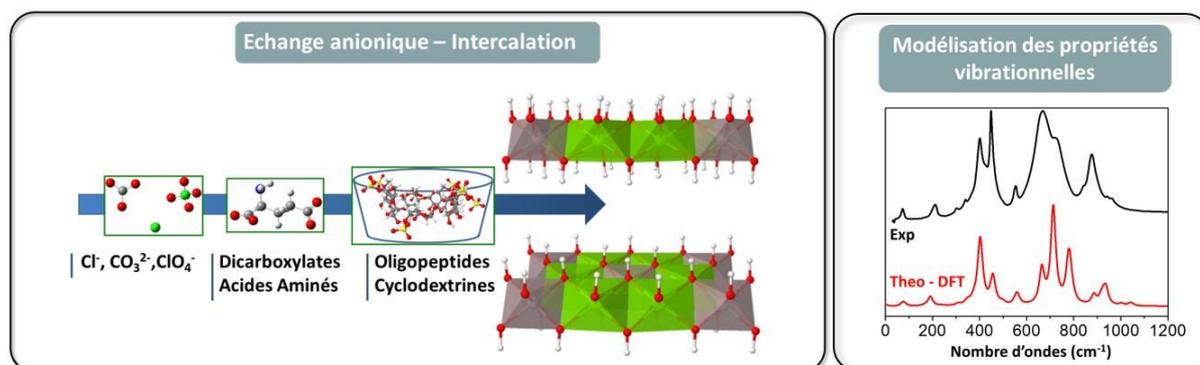
Publications:

- [1] Prampolini, G.; Andersen, A.; Poulter, B.; Khalil, M.; Govind, N.; Biasin, E.; Pastore, M.* "Integrated Quantum-Classical Protocol for the Realistic Description of Solvated Multinuclear Mixed-Valence Transition-Metal Complexes and Their Solvatochromic Properties, *J. Chem. Theory Comput.* 2023.
- [2] Droghetti, F.; Amati, A. Pascale; Crochet, A.; Pastore, M.; Ruggi, A.; Natali, M. "Catalytic CO₂ Reduction with Heptacoordinated Polypyridine Complexes: Switching the Selectivity via Metal Replacement", *ChemSusChem.*, 2023.
- [3] Cerezo J, Gao S, Armaroli N, Ingrosso F, Prampolini G, Santoro F, Ventura B, Pastore M. "Non Phenomenological Description of the Time Resolved Emission in Solution with Quantum Classical Vibronic Approaches Application to Coumarin C153 in Methanol ", *Molecules* . 2023 ; 2 8, 3910.
- [4] Fatihi, M. Y.; Gueddida, S.; Hasnaoui, A.; Lebègue, S.; Pastore, M.* "First-Principles Modeling of the Adsorption Mechanism of Carboxylic and Phosphonic Acids onto Pristine and Defective Delafossite CuAlO₂ Surfaces", 2023.
- [5] Lucarini, F.; Fize, J.; Morozan, A.; Droghetti, F.; Solari, E.; Scopelliti, R.; Marazzi, M.; Natali, M.; Pastore, M.*; Artero, V.; Ruggi, A. "Electro- and photochemical H₂ generation by Co (II) polypyridyl-based catalysts bearing ortho-substituted pyridines", *Sust. Energy Fuels*, 2023, 7, 3384.
- [6] Foucaud, Y.; Ben Jannet, A.; Caramori, S.; Canevesi, R.; Said, M.; Celzard, A.; Fierro, V.; Badawi, M.; Pastore, M.* "Hydration Mechanisms of Tungsten Trioxide Revealed by Water Adsorption Isotherms and First-Principles Molecular Dynamics Simulations", *J. Phys. Chem. C.* 2023, 127 , 11, 5584 5596

IV.7. 2018CPMXX0851 : Modélisation de la structure et des propriétés vibrationnelles d'hydroxydes doubles lamellaires

Responsable : ERWAN André

Laboratoire LCPME UMR7564 CNRS-UL, 405 rue de Vandoeuvre, 54600 Villers-lès-Nancy.



Les matériaux lamellaires, constituent une classe de matériaux dont les propriétés physicochimiques peuvent être exploitées pour répondre à certains problèmes sociétaux dans les domaines de l'énergie, de l'environnement et de la santé au travers d'applications en catalyse, en séparation d'espèces chimiques, ou encore pour l'encapsulation.

Le projet porte sur la simulation numérique de la structure et des propriétés vibrationnelles de matériaux lamellaires et en particulier d'hydroxydes doubles lamellaires (HDL). Une attention particulière est portée sur l'étude des interactions matrice - hôte ainsi qu'au rôle de l'eau dans ces systèmes confinés.

Le but est de construire des modèles suffisamment réalistes de ces matériaux pour permettre la comparaison avec l'expérience. Pour se faire nous modélisons les propriétés de cœur de ces matériaux en DFT via une approche périodique. Or la taille des systèmes étudiés nécessite d'avoir recours aux ressources de calcul du mésocentre pour atteindre les objectifs fixés.

Publications:

- [1] Thèse de Doctorat de Saeid EKRAMI, Propriétés mécaniques et structurales de matrices polymères : modélisation moléculaire et analyse chimiométrique, Université de Lorraine, 2023.

IV.8. 2019CPMXX0886 : Calculs séquentiels rapides en physique et chimie

Responsable : WAX Jean-François

Laboratoire LCP-A2MC, Metz

L'objectif de ce projet transversal était de permettre la création au sein d'EXPLOR d'un noyau dédié aux utilisateurs, physiciens et chimistes, appartenant au pôle CPM. Ce noyau, financé par le pôle, porte sur du calcul séquentiel.

Ouvert aux membres du pôle CPM, les calculs correspondent aux thématiques développées dans ces laboratoires qui, sans exhaustivité, portent sur la structure d'agrégats, d'amorphes et de liquides surfondus, les propriétés électroniques et physico-chimiques des nanomatériaux semi-conducteurs, le transport électronique et atomique de métaux désordonnés, la structure électronique de cristaux et la dynamique cristalline, les propriétés dynamiques et mécaniques des liquides atomiques et moléculaires et de leurs amorphes, la chimie quantique et la dynamique moléculaire, les états excités, l'adsorption, les colloïdes et les billes magnétiques.

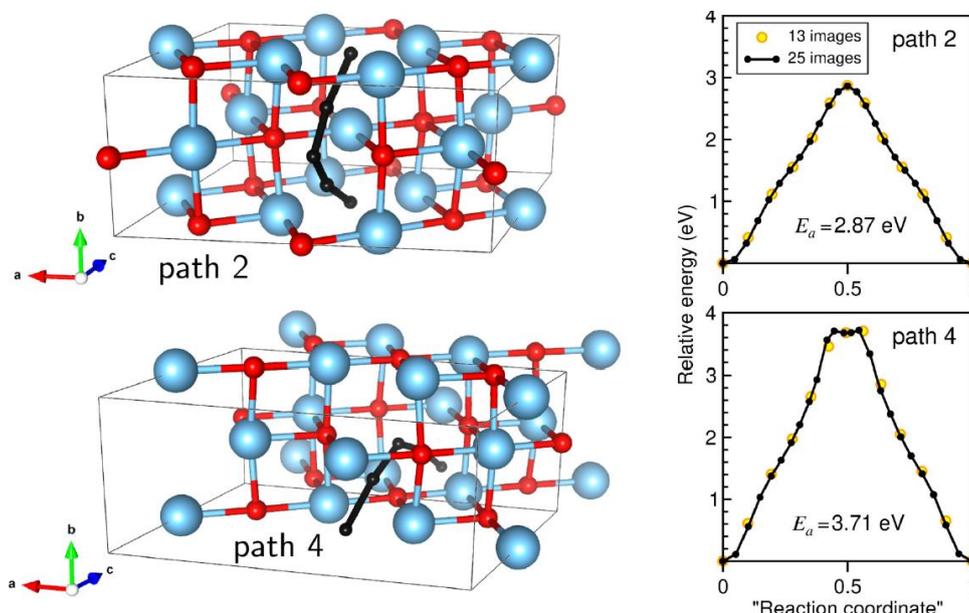
Publications:

- [1] E. Kemgang, R. Messina, The relevance of curvature-induced quadrupolar interactions in dipolar chain aggregation *J. Chem. Phys.* 159, 174903 (2023).
- [2] E. Kemgang, R. Messina, Columnar dipolar clusters defying gravity, *Phys. Rev. E* 105, L012602 (2022).

IV.9. 2019CPMXX0918 : Dynamique de réseau des cristaux mixtes semi-conducteurs

Responsable : POSTNIKOV Andrei

Laboratoire LCP-A2MC, Metz



Deux trajets étudiés pour la diffusion de l'hydrogène dans le monoxyde de titane et les profils énergétiques calculés correspondants. D'après Hosseini, Postnikov et Mohammadzadeh *J.Phys.Chem.C* 127, 11787 (2023).

Le projet a poursuivi le schéma initialement envisagé de simulation à partir des premiers principes des vibrations du réseau dans les alliages de semiconducteurs, dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité, en utilisant des supercellules de quelques dizaines d'atomes et l'approche des phonons gelés. Deux travaux de doctorat tout au long des années 2022-23 dépendaient des calculs effectués dans le cadre du projet. Les activités menées dans le cadre de projets de coopération internationale ont été alimentées par les résultats du projet de calcul. Quatre publications déjà parues et une soumise pour publication en 2023 résument les résultats.

Publications:

- [1] A. Elmahjoubi, M.B. Shoker, O. Pagès, V.J.B. Torres, A. Polian, A.V. Postnikov, C. Bellin, K. Béneut, C. Gardiennet, G. Kervern, A. En Naciri, L. Broch, R. Hajj Hussein, J.-P. Itié, L. Nataf, S. Ravy, P. Franchetti, S. Diliberto, S. Michel, A. Abouais and K. Strza lkowski. Vibrational-mechanical properties of the highly-mismatched $\text{Cd}_{1-x}\text{Be}_x\text{Te}$ semiconductor alloy : experiment and ab initio calculations. *Scientific Reports* 13, 14571 (2023),
- [2] T. Alhaddad, M.B. Shoker, O. Pagès, J.P. Itié, L. Broch, M.B. Bouzourâa, A. Marasek and K. Strza lkowski. Raman study of $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ phonons and phonon-polaritons – Experiment and ab initio calculations. *Journal of Applied Physics* 133, 065701 (2023).
- [3] K. Zhou, A. Daouli, A. Postnikov, A. Hasnaoui and M. Badawi. Potential of nanostructured carbon materials for iodine detection in realistic environments revealed by first-principles calculations. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 25, 26461 (2023).
- [4] S.V. Hosseini, A. Postnikov and M.R. Mohammadzadeh. First-Principles Study of Hydrogen Dynamics in Monoclinic TiO. *The Journal of Physical Chemistry C* 127, 11787 (2023).

IV.10. 2019CPMXX0960 : COMETE (Conception in silico de Matériaux pour l'Environnement et l'Energie)

Responsable : BADAWI Michaël

Laboratoire LPCT, Antenne de St Avold, IUT de chimie (depuis 1er octobre 2023 au L2CM)

Le développement de matériaux plus performants à bas coûts est essentiel pour des applications dans le domaine de l'environnement et de l'énergie. Dans ce contexte, le projet COMETE vise à modéliser des silices amorphes fonctionnalisées pour la production et la purification de biocarburants. Pour le 1er volet concernant la purification des biocarburants de 2e génération, la densité de groupes silanols puis la nature des nanoparticules métalliques à déposer sur les silices mésoporeuses a été optimisée pour maximiser la séparation du phénol, résidu cancérigène vis-à-vis du toluène, molécule modèle des aromatiques. Pour le 2^e volet concernant la production de biocarburants de seconde génération à partir du procédé HDO (HydroDésOxygénation), l'adsorption des réactifs à convertir sur les catalyseurs a été comparée avec celle de molécules inhibitrices.

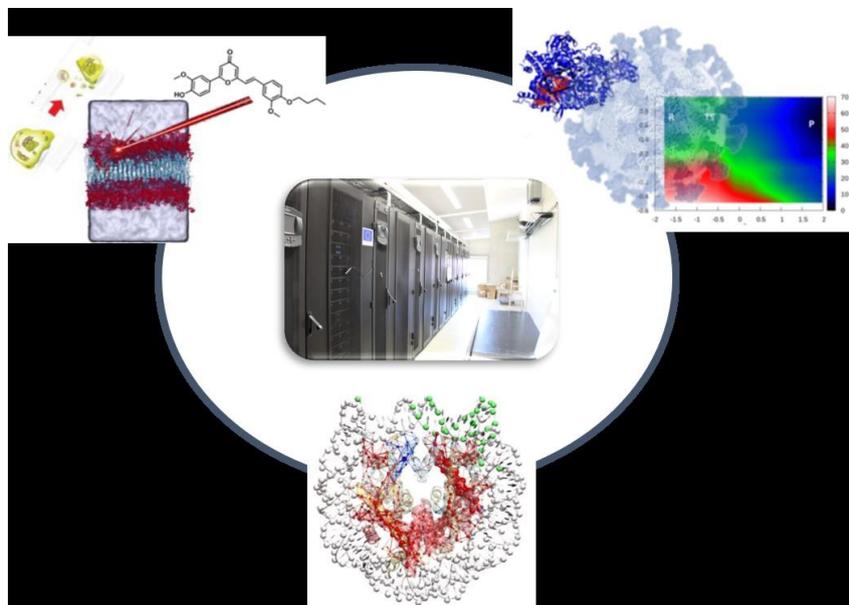
Publications:

- [1] O. Alioui, S. Gueddida, Y. Benguerba, S. Lebègue, M. Badawi, Potential of nickel nanoclusters supported on α -Al₂O₃ (0001) surface for CO₂ capture, energy production, and dry reforming of methane, *Applied Surface Science* 610 (2023) 155474.
- [2] S. Chen, S. Gueddida, M. Badawi, S. Lebègue, J.-M. Giraudon, J. Dhainaut, S. Royer, J.-F. Lamonier, Unravelling the critical role of silanol in Pt/SiO₂ for room temperature HCHO oxidation: An experimental and DFT study, *Applied Catalysis B: Environmental* 331 (2023) 122672.
- [3] C.A. Teles, S. Gueddida, R. Deplazes, C. Ciotonea, N. Canilho, S. Lebègue, J. Dhainaut, M. Badawi, F. Richard, S. Royer, Experimental and ab initio investigation on the effect of CO and CO₂ during hydrodeoxygenation of m-cresol over Co/SBA-15, *ChemCatChem* 15 (2023) e202201327.
- [4] D. Muthukumar, C.M. Nagaraja, M. Badawi, R.S. Pillai, Computer modelling of trace SO₂ and NO₂ removal from flue gases by utilizing Zn(II) MOF catalysts, *New Journal of Chemistry* 47 (2023) 18086–18095.
- [5] K. Zhour, A. Daouli, A. Postnikov, A. Hasnaoui, M. Badawi, Potential of nanostructured carbon materials for iodine detection in realistic environments revealed by first-principles calculations, *Physical Chemistry Chemical Physics* 25 (2023) 26461–26474.

IV.11. 2019CPMXX0983 : Moving Under the Light

Responsable : BIGNON Emmanuelle

Laboratoire LPCT, Vandœuvre-lès-Nancy



The interaction between light and complex matter, as well as the mechanisms behind nucleic acid compaction, gene expression, and viral reproduction are highly complex. Molecular modeling and simulation using a multiscale approach involving either classical and quantum based molecular dynamics is a most valuable technique to allow for the resolution of these complex phenomena with an atomistic and molecular resolution. Notably, with the use of large-scale calculations available on Explor, we have developed new phototherapy drugs, identified the interplay between immune system and RNA viruses and elucidated molecular mechanisms behind DNA compaction. We have clearly shown that the molecular modeling and simulation is nowadays a mature science allowing the development of *in silico* biology and photobiology domains.

Publications (quelques-unes) :

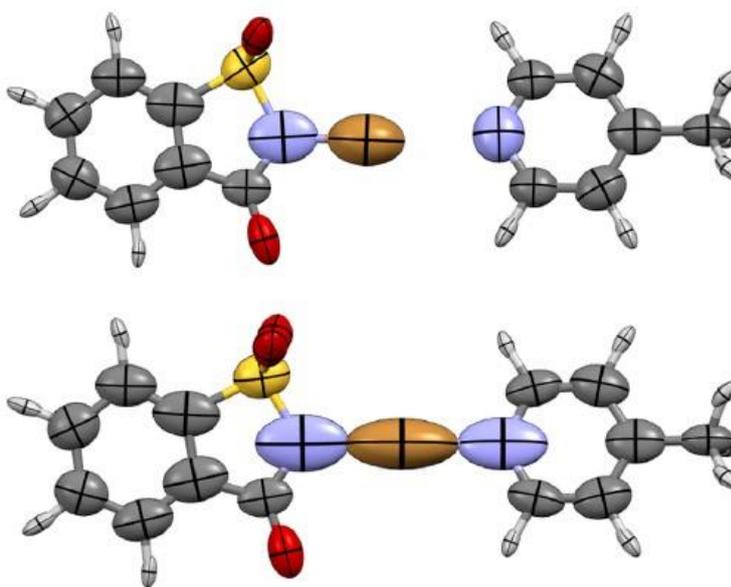
- [1] Popovici I., Barthes C., Tannoux T., Duhayon C., Cassaretto N., Monari A.*, Auffrant A., Canac Y. "Phosphonium Ylides vs Iminophosphoranes: The Role of the Coordinating Ylidic Atom in *cis*-[Phosphine-Ylide Rh(CO)₂] Complexes" (2023) *Inorg. Chem.* 62, 2376. hal-03962127
- [2] Hognon C., Bignon E., Monari A., Marazzi M., Garcia-Iriepe C. "Revealing the Molecular Interactions between Human ACE2 and the Receptor Binding Domain of the SARS-CoV-2 Wild-Type, Alpha and Delta Variants" (2023) *Int. J. Mol. Sc.* 24, 2517. hal-04150197
- [3] Elftmaoui, Zineb, and Emmanuelle Bignon*. "Robust AMBER Force Field Parameters for Glutathionylated Cysteines." (2023) *Int. J. Mol. Sc.* 24, 15022. hal-04487434
- [4] Pecourneau J., Losantos R., Gansmuller A., Parant S., Bernhard Y., Mourer M., Monari A.*, Pasc A "Tuning the competition between photoisomerization and phototherapy in biomimetic cyclocurcumin analogues" (2023) *J. Photochem. Photobiol. A* 439 114583. hal-03960769
- [5] Miclot T., Froux A., D' Anna L., Bignon E., Grandemange S., Barone G., Monari A*, Terenzi A. "Understanding the interactions of Guanine - Quadruplexes with peptides as novel strategies for diagnosis or tuning biological function" (2023) *ChemBioChem* 24 e202200624. hal-03925526.

IV.12. 2019CPMXX0984/2021CPMXX2483 : Etude des interactions à trou sigma

Responsable : AUBERT Emmanuel

Laboratoire CRM2 (UMR 7036), équipe de méthodologie RMN, Vandœuvre-lès-Nancy

Figure: Polarisations atomiques calculées par DFT : (haut) molécules isolées; (bas) molécules au sein de l'adduit



Ce rapport d'activités couvre la période 2022-2023 et complète les précédents documents déposés. Les ressources de calculs ont été utilisées principalement dans le cadre de deux projets collaboratifs ANR successifs : SIGMA-HOLE (ANR-17-CE07-0025) en collaboration avec Rennes et ASYMHOLE (ANR-21-CE07-0014) en collaboration avec Strasbourg, toutes deux centrées sur les interactions à trou sigma et leurs applications en chimie supramoléculaire et catalyse. Les calculs de type DFT sur molécule isolée, en interaction avec un solvant ou en phase cristalline ont permis de caractériser les interactions intermoléculaires potentielles et observées par ailleurs (e.g. expérimentalement par diffraction des rayons X, en solution par RMN). Les connaissances acquises permettent d'affiner le design de nouvelles entités moléculaires, ayant des propriétés de directionnalité et d'amplitude d'interaction utilisées dans des applications de chimie supramoléculaire (contrôle de l'empilement cristallin) et en catalyse.

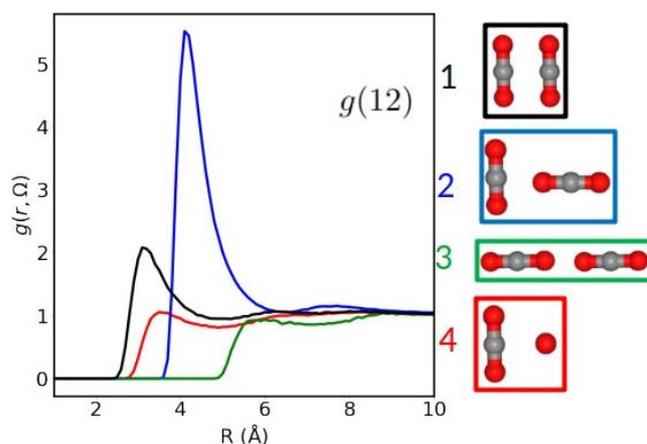
Publications (quelques-unes):

- [1] Aubert, E., Doudouh, A., Wenger, E., Sechi, B., Peluso, P., Pale, P. and Mamane, V. (2022) Eur. J. Inorg. Chem. e202100927. "Chiral Ferrocenyl- Iodotriazoles and - Iodotriazoliums as Halogen Bond Donors. Synthesis, Solid State Analysis and Catalytic Properties" <https://doi.org/10.1002/ejic.202100927>. (hal-03550021)
- [2] Dhaka, A., Jeon, I.-R., Jeannin, O., Aubert, E., Espinosa, E., Fourmigué, M. (2022) Angewandte Chemie International Edition, Wiley-VCH Verlag, 2022, pp.e202116650. "Topochemical Polymerization of a Diacetylene in a Chalcogen-Bonded (ChB) Assembly" (10.1002/anie.202116650). (hal-03555294)
- [3] Zhang, J., Aribot, F., Chambron, J.-C., Zorn, N., Leize-Wagner, E., Jean, M., Vanthuyne, N., Espinosa, E., Aubert, E. (2023) Eur. J. Inorg. Chem., e202300284 "Organoplatinum-Bridged Cyclotribenzylene Dimers". doi.org/10.1002/ejic.202300284

IV.13. 2020CPMXX2162 : Calcul de la compressibilité dans le CO₂ supercritique

Responsable : CAROF Antoine

Laboratoire LPCT, Vandœuvre-lès-Nancy



L'objectif de ce projet est d'explorer les caractéristiques de la solvation dans des environnements complexes tels que le CO₂ supercritique et les hydroxydes lamellaires (LDH). Ces deux milieux sont essentiels pour le développement d'une chimie plus respectueuse de l'environnement, notamment dans des applications telles que l'extraction par un solvant non toxique et les processus de dépollution. Cependant, les propriétés de solvation restent mal comprises, en particulier en ce qui concerne l'organisation microscopique du solvant et l'évolution de la solubilité en fonction des conditions thermodynamiques telles que la pression, la température et l'hydrométrie. Nous exploitons les ressources d'EXPLOR pour affiner nos techniques en réponse à la complexité de ces systèmes. Nous utilisons à la fois des outils standard de simulation moléculaire tels que la DFT électronique et la dynamique classique, ainsi que de nouvelles méthodes de simulation telles que la DFT moléculaire (MDFT) adaptée au CO₂ supercritique.

Publications:

- [1] Prampolini, G.; Porwal, V. K.; Carof, A.; Ingrassio, F. Tautomeric Contributions to the Absorption Spectrum of [2,2'-Bipyridyl]-3,3'-Diol in Water Unveiled by Molecular Dynamics with Accurate Quantum Mechanically Derived Force-Fields. *J. Mol. Liq.* 2024, 396, 123898. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.123898>.
- [2] Mohamed Houssein, M.; Belloni, L.; Borgis, D.; Ingrassio, F.; Carof, A. Molecular Integral Equations Theory in the near Critical Region of CO₂. *arXiv* March 13, 2024. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2310.14667>.
- [3] Porwal, V. K.; Carof, A.; Ingrassio, F. Hydration Effects on the Vibrational Properties of Carboxylates: From Continuum Models to QM/MM Simulations. *J Comput Chem* 2023, 44 (23), 1898–1911. <https://doi.org/10.1002/jcc.27171>.

IV.14. 2022CPMXX2687 : Enumération de conformations de protéines à l'aide d'une approche Branch-and-Prune

Responsable : MALLIAVIN Thérèse

Laboratoire LPCT, Vandœuvre-lès-Nancy

L'étude de la structure des biomolécules est cruciale en biologie pour comprendre les fonctions biologiques au niveau atomique et moléculaire. Différentes méthodes comme la cristallographie aux rayons X, la RMN et la microscopie électronique sont utilisées pour déterminer les structures des protéines, mais ces approches sont plus efficaces pour les structures ordonnées.

Les protéines intrinsèquement désordonnées (IDP) sont essentielles en biologie structurale des protéines car elles représentent une part importante du protéome humain, avec des résidus désordonnés constituant 35 à 50% du protéome. Leur plasticité conformationnelle leur permet d'interagir avec de nombreux partenaires cellulaires, ce qui explique leur impact significatif dans la signalisation, la régulation et le contrôle, ainsi que les différences observées dans leurs interactomes par rapport aux protéines globulaires.

Des méthodes d'optimisation telles que le recuit simulé, les algorithmes génétiques et les approches bayésiennes sont utilisées pour déterminer les structures protéiques, mais la convergence des calculs est souvent nécessaire. L'approche « interval Branchand-Prune » iBP et « threading-augmented branch-and-prune » TAIiBP ont été développées pour résoudre le problème de détermination de la structure des protéines par RMN en réduisant la barrière combinatoire et en améliorant l'efficacité de calcul pour des protéines de taille moyenne.

Publications:

- [1] Delort A, Cottone G, Malliavin TE and Müller MM. Conformational Space of the Translocation Domain of Botulinum Toxin: Atomistic Modeling and Mesoscopic Description of the Coiled-Coil Helix Bundle. soumis.
- [2] Goudiaby I, Malliavin TE, Mocchetti E, Mathiot S, Acherar S, Frochet C, Barberi-Heyob M, Guillot B, Favier F, Didierjean C, Jelsch C. New Crystal Form of Human Neuropilin-1 b1 Fragment with Six Electrostatic Mutations Complexed with KDKPPR Peptide Ligand. *Molecules*. 2023 Jul 24;28(14):5603. doi: 10.3390/molecules28145603.
- [3] Hengeveld SB, Merabti M, Pascale F, Malliavin TE. A Study on the Covalent Geometry of Proteins and Its Impact on Distance Geometry. 6th International Conference on Geometric Science of Information (GSI'23), Aug 2023, Saint Malo, France. pp.520-530, <doi: 10.1007/978-3-031-38299-4 54>. <hal-04183511>
- [4] Huang SY, Chang CF, Lin JH, Malliavin T. Exploration of Conformations for an Intrinsically Disordered Protein. Frank Nielsen; Frédéric Barbaresco. *Geometric Science of Information : 6th International Conference, GSI 2023, St. Malo, France, August 30 –September 1, 2023, Proceedings, Part II*, 14072, Springer Nature Switzerland, pp.531-540, 2023, *Lecture Notes in Computer Science*, 978-3-031-38299-4. <doi: 10.1007/978-3-031-38299-4 55>. <hal-04184686>

V. Pôle scientifique Énergie, Mécanique, Procédés, Produits (EMPP)

V.1. 2017EMPPX0195 : Computations of the thermoelectric materials

Responsable : CHAPUT Laurent

Laboratoire LEMTA, Vandœuvre-lès-Nancy

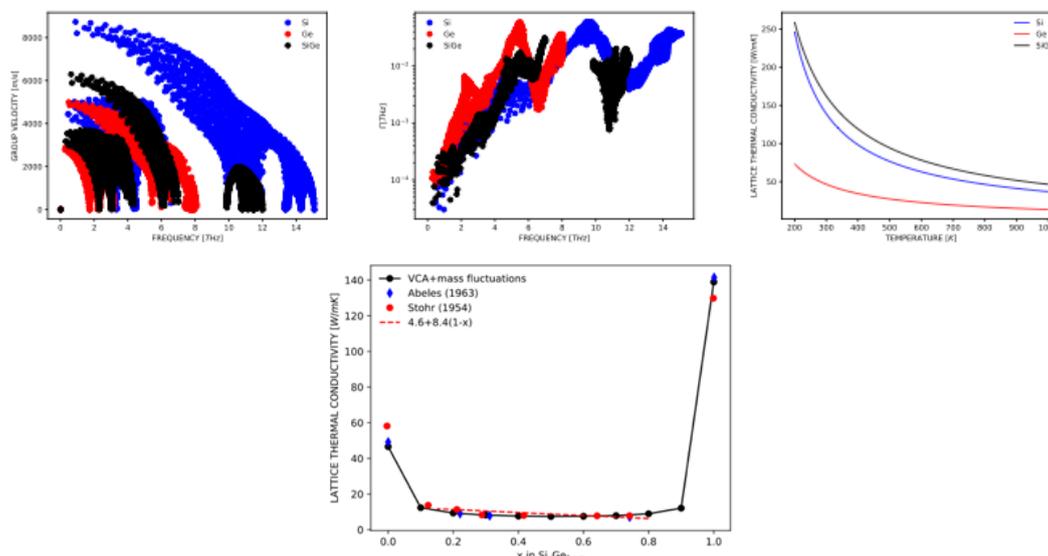


Figure. Module de la vitesse de groupe, temps de vie et conductivité thermique pour Si, Ge et SiGe et pour les alliages de $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$

Nous utilisons diverses techniques (DFT, dynamique moléculaire, Monte Carlo) pour étudier les transferts thermiques dans les matériaux, notamment les effets thermoélectriques, aux interfaces, et dans les nanostructures. Une bonne compréhension des transferts thermique, de l'échelle de l'électron jusqu'à la nanostructure, est importante dans une société qui se veut plus économe en énergie. Nous étudions ces transferts à partir de calculs DFT, de dynamique moléculaire, et Monte Carlo.

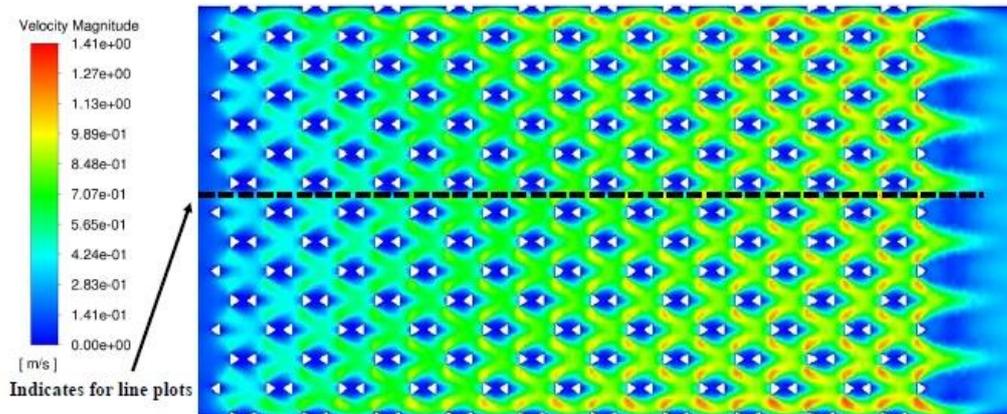
Publications (quelques-uns) :

- [1] Y. Han, Yang, C. Zhao, H. Bai, Y. Li, J. Yang, Y.-T. Chen, G. Hong, D. Lacroix, M. Isaiev, Modulating thermal transport in a porous carbon honeycomb using cutting and deformation techniques, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 24 (5), 3207-3215.
- [2] X. Wang, W. Gonçalves, D. Lacroix, M. Isaiev, S. Gomès, K. Termentzidis, Thermal conductivity temperature dependence of water confined in nanoporous silicon, *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 34 (30), 305701.
- [3] L. Klochko, J. Noel, N.R. Sgreva, S. Leclerc, C. Métivier, D. Lacroix, M. Isaiev, Thermophysical properties of n-hexadecane: Combined molecular dynamics and experimental investigations, *Int. Com. In Heat and Mass Transfer*, 137, 106234.
- [4] P. Lishchuk, A. Vashchuk, S. Rogalsky, L. Chepela, M. Borovyi, D. Lacroix, M. Isaiev, Thermal transport properties of porous silicon filled by ionic liquid nanocomposite system, *Sci. Rep.* 13, 5889 (2023).
- [5] M. De Vos, A. Zimmer, M. Toledo, J. Ghanbaja, E. Haye, G. Pernot, D. Lacroix, Nicolas Stein, Tuning the physico-chemical properties of SnSe films by pulse electrodeposition, *Applied Surface Science*, Volume 621, 156845, (2023).

V.2. 2017EMPPX0317 : Caractérisation des propriétés thermiques homogènes équivalentes de mousses céramiques solides

Responsable : PARENT Giles

Laboratoire LEMTA, Vandœuvre-lès-Nancy



Ce projet est originellement lié à la thèse de Morgan Sans (2016-2019) lors de laquelle il était question de déterminer des propriétés thermiques équivalente de mousses céramiques solides. Les techniques utilisées étaient principalement basées sur la méthode de Monte Carlo, très consommatrice de temps CPU. Cette thèse s'est poursuivie par une seconde thèse, celle de Raj Konduru (2020 – 2023) lors de laquelle le transfert de chaleur par advection a été ajouté.

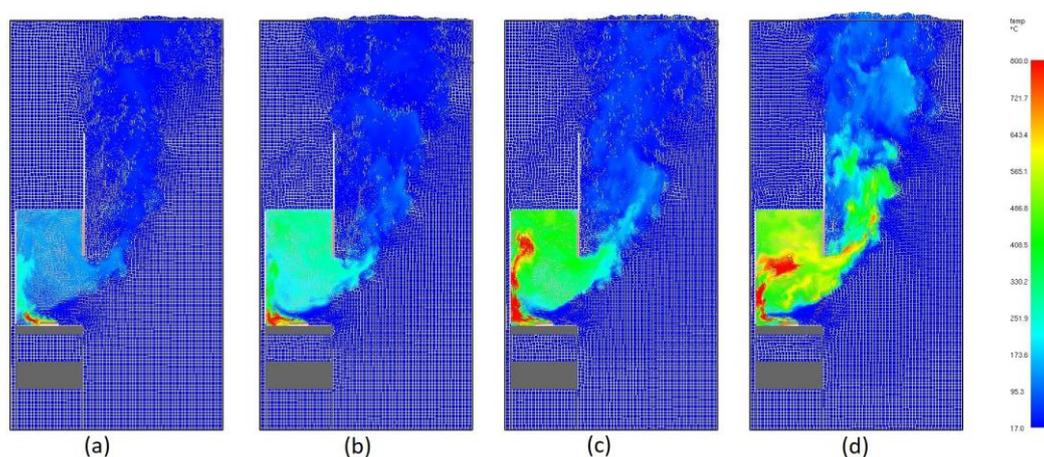
Publications:

- [1] Morgan Sans, Olivier Farges, Vincent Schick, Gilles Parent, Solving transient coupled conductive and radiative transfers in porous media with a Monte Carlo Method: Characterization of thermal conductivity of foams using a numerical Flash Method, *International Journal of Thermal Sciences*, Volume 179, 107656, <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2022.107656>
- [2] Raj Narayan Konduru, Olivier Farges, Gilles Parent, Vincent Schick. Semi Mesh-less model for Combined Conduction-Convection-Radiative transfer: Application to Porous Heat Exchanger. *International Heat Transfer Conference 17*, Aug 2023, Cape Town, France. pp.10, <https://doi.org/10.1615/IHTC17.50-20> ; hal-04362764
- [3] Raj Narayan Konduru, Olivier Farges, Vincent Schick, Patrick Hairy, Yves Gaillard, Gilles Parent, Experimental and numerical investigation of porous heat exchangers with Kelvin cell structured foam at high temperatures: Coupled conduction-convection and radiation heat transfer, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Volume 224, 2024, <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2024.125253>.
- [4] Thomas Villemin, Olivier Farges, Gilles Parent, Rémy Claverie, Monte Carlo prediction of the energy performance of a photovoltaic panel using detailed meteorological input data, *International Journal of Thermal Sciences*, Volume 195, 2024, c.

V.3. 2018EMPPX0357 : Etude du mouvement des fumées issues d'un incendie dans un tunnel

Responsable : MEHADDI Rabah

Laboratoire LEMTA, Vandœuvre-lès-Nancy



Ce rapport résume les investigations numériques réalisées par l'Equipe de Recherche FEUX du LEMTA sur le ordinateur EXPLOR. Le projet avait été initié suite à une collaboration de l'équipe avec la Société du Grand Paris. Ce projet a pris fin en 2020. Par la suite, nos investigations numériques ont pris plus d'importance et se sont diversifiées, en lien avec de grands projets liés aux sciences de l'incendie, qui nécessite des simulations en transferts couplés sur de grands domaines de calcul. Le code utilisé est essentiellement Fire Dynamics Simulator (FDS), un code open-source de la communauté scientifique sur les incendies.

Publications :

- [1] Mehaddi, R., Collin, A., Boulet, P., Acem, Z., Telassamou, J., Becker, S., ... & Morel, J. Y. (2020). Use of a water mist for smoke confinement and radiation shielding in case of fire during tunnel construction. *International Journal of Thermal Sciences*, 148, 106156.
- [2] Bouaza Lafdal, Pascal Boulet, Rabah Mehaddi, El Mehdi Koutaiba. « A comparison between FDS and OpenFoam in case of under-ventilated compartment fire », 38th International Symposium on Combustion, Jan 2021, Adelaïde, Australia.
- [3] Lafdal B., Djebbar R., Mehaddi R., Boulet P., Koutaiba E., Beji T., Torero J.L. Numerical study of the combustion regimes in naturally-vented compartment fires. *Fire Safety Journal*. Volume 131, July 2022, 103604
- [4] A. STREIT, B. GUILLAUME, B. GIRARDIN, L. TERREI, A. COLLIN and A. MARCHAND. Fire propagation from surface to canopy on ornamental species under wind in laboratory conditions. 9th International Conference on Forest Fire Research, November 2022, Coimbra, Portugal.
- [5] Solange Ferriere, Alexis Marchand, Lucas Terrei, Zoubir Acem et Anthony Collin, « Applications de WFDS à des expérimentations de feux de végétation à l'échelle du laboratoire », 27ème Congrès français de thermique, Nantes, 2019

V.4. 2018EMPPX0394 : Simulation numérique du rayonnement thermique dans des mélanges de gaz de combustion

Responsable : ASLLANAJ Fatmir

Laboratoire LEMTA, Vandœuvre-lès-Nancy

Motivé par la lutte contre le réchauffement climatique, nous avons mené des travaux sur la simulation numérique du rayonnement thermique dans des mélanges de gaz de combustion en vue d'utiliser des carburants moins émetteurs de polluants. Nous avons développé un nouveau modèle de rayonnement de gaz de combustion basé sur WSGG (Weighted Sum of Gray Gases) qui a la rapidité de ce dernier et présente l'avantage d'être beaucoup plus précis. Nous avons implémenté ce nouveau modèle dans notre code de rayonnement et nous avons simulé le rayonnement thermique des mélanges gazeux non isothermes et non homogènes au sein d'une géométrie 3D représentative d'une chambre de combustion.

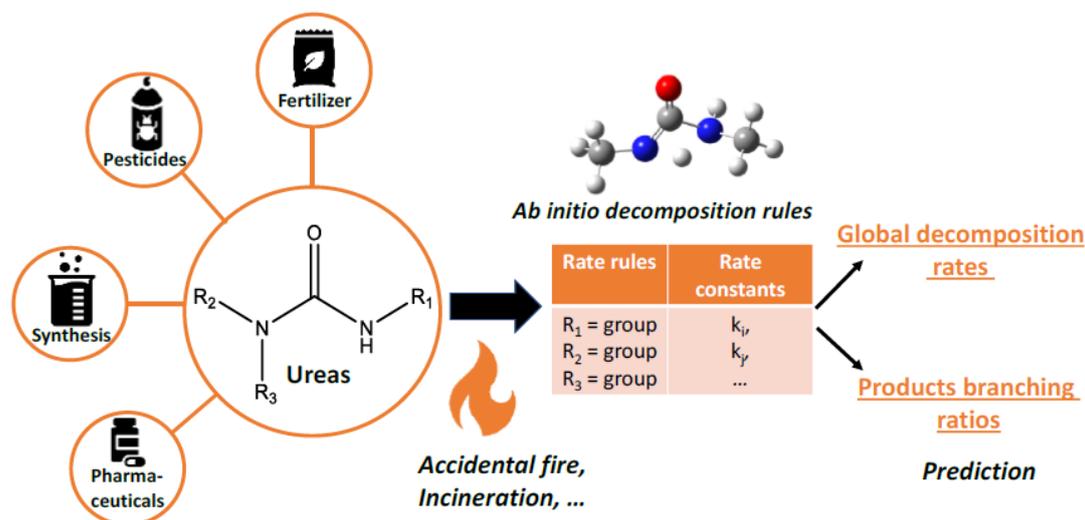
Publications:

- [1] R. J. Collet da Fonseca, G. C. Fraga, F. Asllanaj, F. H. R. Fran_ca. An extension of the wide-band based weighted-sum-of-gray-gases model applied to high pressure, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2024 (soumis).
- [2] F. Asllanaj, S. Contassot-Vivier, G. C. Fraga, F. H. R. Fran_ca, R. J. Collet da Fonseca. New gas radiation model of high accuracy based on the principle of weighted sum of gray gases, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 315, p. 108887, DOI :10.1016/j.jqsrt.2023.108887,3 2024, hal-04375649v1.
- [3] F. Asllanaj, F. H. R. Fran_ca, J.R. Roche, R.J. Collet da Fonseca, O. Botella. New gas radiation model based on the principle of weighted sum of gray gases. Application to CO₂-H₂O mixtures at high temperature, *Numerical Heat Transfer B*, DOI :10.1080/10407790.2023.2220904, 2023, hal-04133402v1.

V.5. 2018EMPPX0701 : Modélisation cinétique détaillée de réactions thermiques en phase gazeuse

Responsable : FOURNET René

Laboratoire Réactions et Génie des Procédés (LRGP), UMR 7274 CNRS, Université de Lorraine



Ce projet scientifique s'inscrit dans les thématiques de recherche de l'axe CITHERE (Cinétique, Thermodynamique, Énergie) du Laboratoire Réactions et Génie des Procédés (LRGP), et plus particulièrement dans le Groupe de Cinétique Radicalaire (GCR). Une des activités majeures de notre groupe consiste à développer des mécanismes cinétiques détaillés en phase gazeuse pour des réactions d'oxydation, de pyrolyse et de combustion de carburants usuels ou issus de la biomasse, ou encore pour des toxiques chimiques. Au cours de la période 2022-2023, les principales études ont porté sur la pyrolyse et la combustion de composés toxiques issus de pesticides dans le cadre du projet CATCH, financé par la région Grand-Est.

Publications:

- [1] J. Honorien, R. Fournet, P.-A. Glaude, B. Sirjean, Theoretical Study of the Thermal Decomposition of Urea Derivatives, *J. Phys. Chem. A* 126 (2022) 6264-6277.
- [2] J. Honorien, B. Sirjean, P.-A. Glaude, R.J.C. Fournet, Flame, A comprehensive kinetic study of the combustion mechanism of methyl isocyanate, *255* (2023) 112913.

V.6. 2018EMPPX0815 : Simulation DNS d'écoulements turbulents chargés en particules solides ellipsoïdales

Responsable : ARCEN Boris

Laboratoire LEMTA, Vandœuvre-lès-Nancy



Figure. Simulation DNS présentant l'interaction entre des structures cohérentes (en vert) et des ellipsoïdes de révolution (la couleur dépend de l'orientation) au sein d'un écoulement turbulent de canal. Le nombre de Reynolds de l'écoulement est $Re_\tau = 1000$ et le rapport d'aspect des ellipsoïdes est égal à 3.

La prédiction de l'évolution spatio-temporelle d'un nuage de particules non sphériques dans un écoulement turbulent de fluide est à ce jour particulièrement complexe. Afin de caractériser finement l'interaction entre des particules non sphériques et un écoulement turbulent de fluide, un outil numérique basé sur la simulation numérique directe des équations de Navier Stokes (DNS) et un suivi lagrangien de particules ellipsoïdales est utilisé. Cet outil permet notamment d'étudier l'effet du nombre de Reynolds de l'écoulement et de la modélisation des forces et du couple agissant sur les particules.

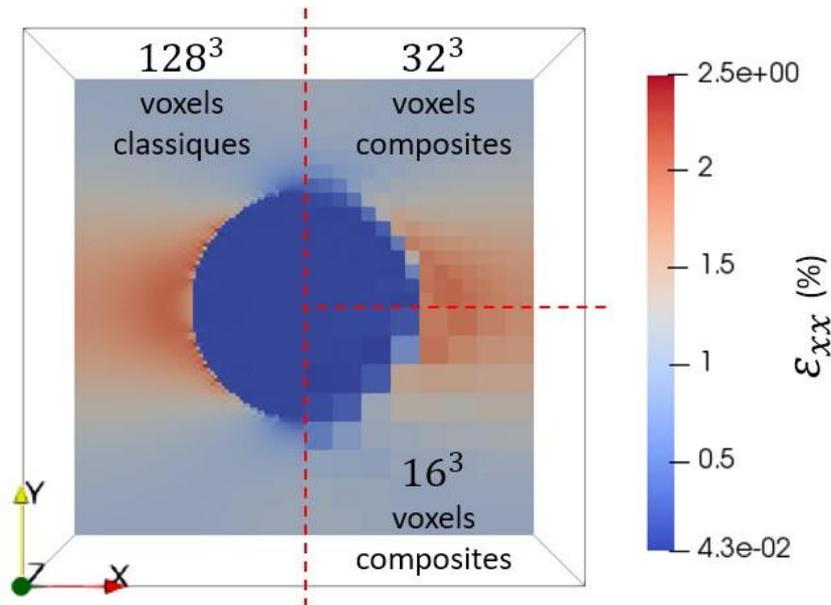
Publications:

- [1] A. Michel and B. Arcen. Translational and angular velocities statistics of inertial prolate ellipsoids in a turbulent channel flow up to $Re_\tau = 1000$ ". Journal of Fluid Mechanics, 966, 2023. Doi 10.1017/jfm.2023.420.

V.7. 2019EMPPX0898 : RHÉOLOGIE DES POLYMÈRES ET MÉCANIQUE DES COMPOSITES : MODÉLISATION ET CALCULS PAR MÉTHODES FFT

Responsable : BOISE Julien

Laboratoire LEMTA, Vandœuvre-lès-Nancy



Dans le cadre ce projet nous utilisons des codes de calcul mécanique utilisant les méthodes FFT (Fast Fourier Transform). 2 codes sont actuellement développés / utilisés sur EXPLOR, le code AMITEX et le code CraFT-Virtual-DMA. Un couplage “champ de phase / mécanique” est en cours de développement sur le code AMITEX. Ce dernier permet de modéliser les micromécanismes de déformation s’opérant à des échelles du nm au μm dans les polymères semi-cristallins et certains alliages métalliques. Le code CraFT-Virtual-DMA quant à lui permet de calculer la réponse mécanique d’un VER (Volume Élémentaire Représentatif) sollicité en contrainte ou déformation cyclique. Il fait l’objet d’un portage en Python/Cuda (Virtual-DMA) afin de gagner un facteur ≥ 10 sur le temps de calcul (cas des grosses boîtes de calcul : 1283 à 5123).

Publications:

- [1] S. André, J. Boisse, and C. Noûs, An FFT solver used for virtual Dynamic Mechanical Analysis experiments: Application to a glassy/amorphous system and to a particulate composite, *Journal of Theoretical, Computational and Applied Mechanics (JTCAM)*, (2021) 1-19.

V.8. 2020EMPPX2055 : Modélisation de la microstructure de polymères

Responsable : MEIMAROGLOU Dimitrios

Laboratoire Réactions et Génie des Procédés (LRGP), UMR 7274 CNRS, Université de Lorraine

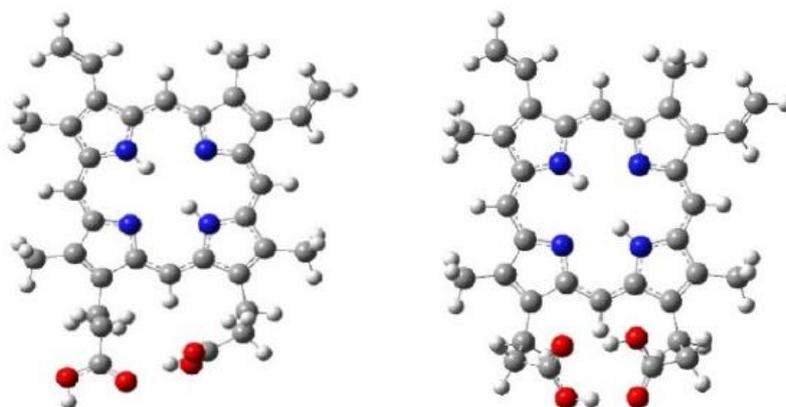
L'objectif de ce projet était l'exécution de programmes, contenant des modèles mathématiques, développés principalement sous MATLAB®. Pendant la période 2022-23 aucune simulation n'a été effectuée. Cependant, il est souhaitable de maintenir le compte ouvert au vu d'une nouvelle thèse qui commencera courant 2024 et qui nécessitera des ressources de calcul.

Dans le cadre de l'activité du groupe Génie des Produits, au sein du Laboratoire Réactions et Génie des Procédés (LRGP), sur la modélisation du lien entre les paramètres d'un procédé et les différentes propriétés et fonctions d'usage des produits obtenus, une série de techniques de modélisation phénoménologique ou basée sur les données (Data-driven) sont employées. Jusqu'à présent, tous les programmes sont développés sous Fortran, Matlab ou Python et les simulations engendrant souvent de délais très longs sur l'avancement des travaux. C'est pour cela que l'accès aux ressources EXPLOR serait très bénéfique et important pour les travaux de notre groupe.

V.9. 2020EMPPX2068 : Etude par TD-DFT de photosensibilisateurs pour la thérapie photodynamique anti-cancéreuse

Responsable : FROCHOT Céline

Laboratoire Réactions et Génie des Procédés (LRGP), UMR 7274 CNRS, Université de Lorraine



The main aims of the calculation on Explor were:

- 1) To optimize the geometry of molecules.
- 2) To calculate the partition coefficient of different photosensitizers.

Gaussian 16 program package was used to calculate the partition coefficient of PpIX and PPa. DFT method with two functionals: B3LYP (Becke's three parameter Lee–Yang–Parr), ω B97XD were set to optimize geometries of the studied molecules in n-octanol and water. Within all calculations, the 6-31G(d), 6-31+G(d,p) and 6-311++G(d,p) basis sets were employed for both B3LYP and ω B97X-D level of theory. SMD, C-PCM and IEF-PCM implicit continuum models were chosen to approximate the influence of the solvents. The optimized structures were confirmed to be real minima by vibration analysis (no imaginary frequencies). The theoretical logarithm of partition coefficient (DFT-logP) for the water/n-octanol mixture was calculated according to the following equation:

$$DFT - \log P = \frac{\Delta G_{water} - \Delta G_{n-octanol}}{2.303RT} \quad (1)$$

where ΔG values are the Gibbs energies of the solvated molecules in the relevant solvent. For each PSs/method combination, the same methodology has been applied. The first step was to optimize the geometry in the gas phase. This geometry was used as a starting point for the second step of the geometry optimization, which was performed in the various implicit solvent models. Then, the logarithms of partition coefficients were evaluated based on the Gibbs energies from optimized structure (Eq. 1).

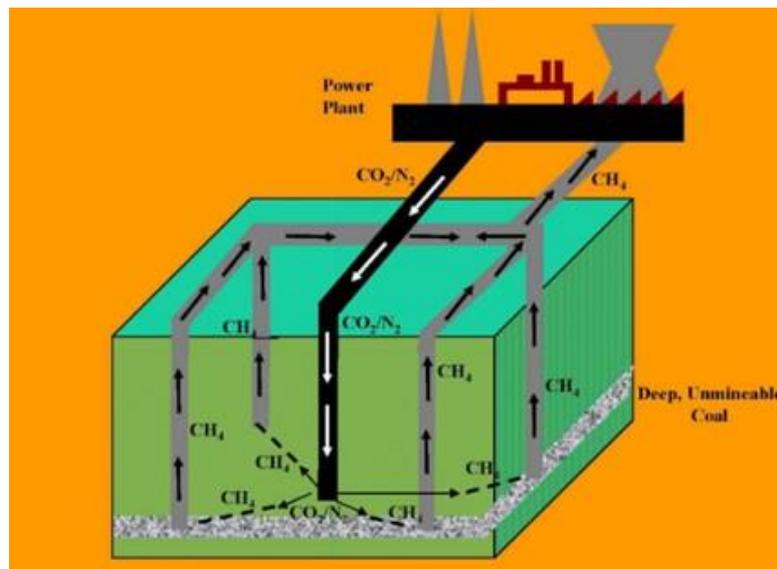
Publications:

- [1] Myrzakhmetov B., Honorien J., Arnoux P., Fournet R., Tsoy I., Frochot C., Lipophilicity prediction of 3 photosensitizers by liquid-liquid extraction, HPLC, and DFT methods, *Luminescence: The Journal of Biological and Chemical Luminescence*, 37(9), 1597-1608 (2022) .1002/bio.4336.10

V.10. 2020EMPPX2087 : Modélisation multi-échelle des réservoirs de gaz de charbon

Responsable : LE Tien Dung

Laboratoire LEMTA, Vandœuvre-lès-Nancy



Ce projet est destiné à développer des modèles couplés des phénomènes multi-physiques, multi-échelles en milieu poreux, notamment pour une application d'amélioration de l'exploitation de gaz de charbon par injection du CO₂. L'enjeu scientifique réside dans le couplage complexe des phénomènes d'adsorption des gaz dans des nanopores, de la déformation et de l'écoulement multi-échelle. Pour relever ce défi, on utilise la Théorie Fonctionnelle de la Densité (DFT) permettant de calculer les profils de la densité et la force de solvation qui auront une répercussion significative sur les propriétés de mécanique et de transport à l'échelle macroscopique.

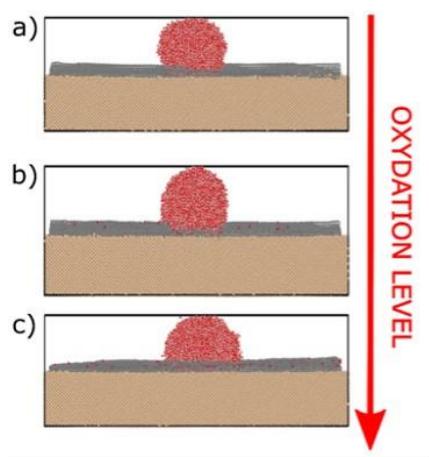
Publications:

- [1] Analyse Q. D. Ha, T. D. Le, I. Panlov, C. Moyne, M. Murad, Upscaling poromechanical models of coalbed methane reservoir incorporating the interplay between non-linear cleat deformation and solvation forces, *International Journal of Solids and Structures*, 262-263, 112083- (2023).

V.11. 2020EMPPX2217 : Simulation Energie LEMTA

Responsable : CHAPUT Laurent

Laboratoire LEMTA, Vandœuvre-lès-Nancy



Wetting properties of the functionalized silicon substrates

These investigations were performed using molecular dynamics simulations to identify more precisely the wettability features of the substrate functionalized by the CNWs. For this, we considered the initial configurations of the system presented in Fig. 1. The silicon surface was covered by carbon nanowalls (CNWs), which were simulated like sheets of graphene. Some atoms of the carbon were randomly oxidized. We considered different initial configurations of the oxygen atoms for the same oxidation level. The following potential was chosen for the system dynamics: (i) OPLS was used to simulate graphene oxide (GO) sheets. All bonds, angles, and dihedrals were created and all required parameters were found taking into account difference between C-atoms connected/not connected with O; (ii) LJ potential is used for simulation Water-OE (oxygen as part of epoxy group) interaction as well as for Water-Si, Water-GO and Si-GO); (iii) SW is used for bulk Si simulation; (iv) SPC/E model is used for water.

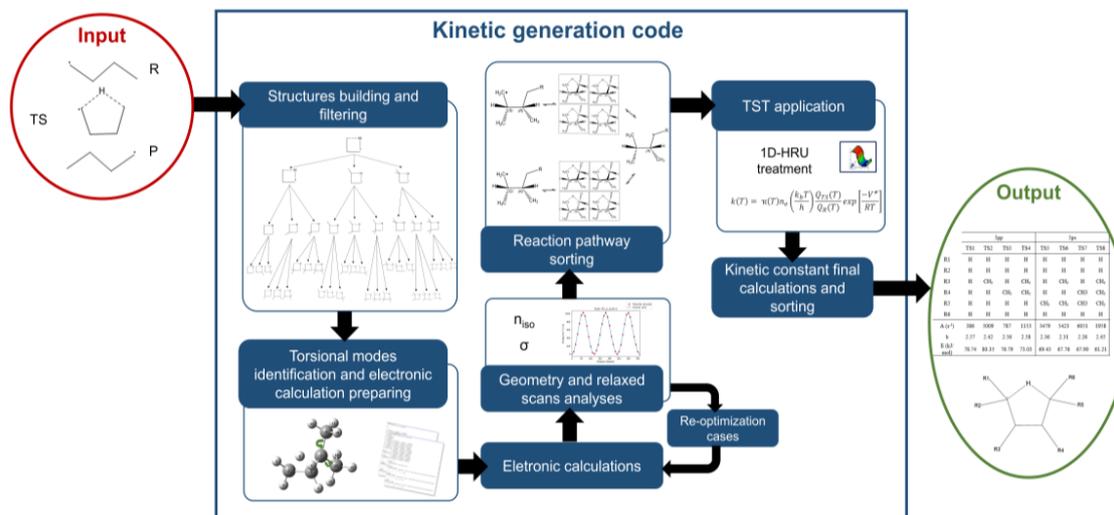
Publications:

- [1] M. Isaiev, G. Mussabek, P. Lishchuk, K. Dubyk, N. Zhylybayeva, G. Yar-Mukhamedova, D. Lacroix, V. Lysenko, Application of the Photoacoustic Approach in the Characterization of Nanostructured Materials, *Nanomaterials*, vol. 12 (4), 708, <https://www.mdpi.com/2079-4991/12/4/708>, 2022.
- [2] W. Gonçalves, M. Isaiev, D. Lacroix, S. Gomès, K. Termentzidis, Interfacial thermal resistance between nanoconfined water and silicon: Impact of temperature and silicon phase, *Surfaces and Interfaces*, vol. 33, 102188, <https://doi.org/10.1016/j.surfin.2022.102188>, 2022.
- [3] L. Klochko, V. Mandrolko, G. Castanet, G. Pernot, F. Lemoine, K. Termentzidis, D. Lacroix, M. Isaiev, Molecular dynamics simulation of thermal transport across a solid/liquid interface created by a meniscus, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, <https://doi.org/10.1039/d2cp04601f>, 2023.
- [4] M. Isaiev, Y. Mankovska, V. Kuryliuk, D. Lacroix, Thermal transport properties of nanoporous silicon with significant specific surface area, *Appl. Phys. Lett.* 24 April 2023; 122 (17): 172201. <https://doi.org/10.1063/5.0148434>
- [5] D. Lacroix, M.I. Nkenfack, G. Pernot, M. Isaiev, Thermal properties of nanoporous materials, large scale modelling with the use of Monte Carlo phonon transport autocorrelation, *J. Appl. Phys.* 134, 025101 (2023), <https://doi.org/10.1063/5.0155582>

V.12. 2021EMPPX2491 : Modélisation cinétique détaillée des procédés pour l'énergie et l'environnement

Responsable : FOURNET René

Laboratoire Réactions et Génie des Procédés (LRGP), UMR 7274 CNRS, Université de Lorraine



Ce projet scientifique s'inscrit dans les thématiques de recherche de l'axe CITHERE (Cinétique, Thermodynamique, Énergie) du Laboratoire Réactions et Génie des Procédés (LRGP), et plus particulièrement dans le Groupe de Cinétique Radicalaire (GCR). Il vient en remplacement du projet 2018EMPPX0701 pour lequel une demande de clôture a été demandée. Par ailleurs, Il fait suite à l'achat de machines par le LRGP qui sont hébergées par le mésocentre. L'objectif de ce projet consiste à utiliser les moyens informatiques d'EXPLOR afin d'étudier et de modéliser la cinétique des réactions de composés organiques avec des applications dans le domaine de l'énergie, de l'environnement et de la sécurité. Ces études permettent de développer des mécanismes réactionnels détaillés capables de reproduire les processus de pyrolyse, d'oxydation ou de combustion en phase gazeuse et, désormais, en phase liquide.

Publications:

- [1] [1] F. Citrangolo Destro, R. Fournet, V. Warth, P. A. Glaude, B. Sirjean, Impact of the size and degree of branching of alkanes on the rate rules approach: The case of isomerizations, Proc. Combust. Inst. 39 (2023) 611-620.
- [2] M.D. Le, Z. El Sayah, R. Benrabah, V. Warth, P.A. Glaude, R. Privat, R. Fournet, B. Sirjean, An experimental and detailed kinetic modeling of the thermal oxidation stability of n-decane as a jet fuel surrogate component, Fuel 342 (2023) 127754.

V.13. 2021EXTXX2356 : Simulation de spectres de photoélectrons de composés oxygénés formés lors de l'oxydation du cyclohexane à basse température

Responsable : BOURGALAIS Jérémy

Laboratoire Réactions et Génie des Procédés (LRGP), UMR 7274 CNRS, Université de Lorraine

Une connaissance fine de la chimie d'oxydation d'hydrocarbures et de biocarburants est importante pour le développement de procédés de conversion d'énergie plus économique et écologique. Au LRGP, des chercheurs reproduisent en laboratoire la combustion de carburants dans des conditions proches des applications industrielles et utilisent la spectrométrie de masse sur synchrotron pour identifier les produits des réactions d'oxydation. Cette identification nécessite des calculs théoriques pour valider les attributions faites sur la base des données expérimentales. Dans le cas d'une étude faite sur l'oxydation du cyclohexane, des intermédiaires oxygénés non inclus dans les modèles cinétiques existants ont pu être identifiés, soulignant la nécessité d'améliorer ces modèles pour améliorer leur prédiction des émissions lorsqu'ils seront utilisés pour le design de nouveaux procédés industriels.

Publications:

- [1] Bourgalais, J., Mercier, X., Al-Mogren, M.M., Hochlaf, M., Accurate Prediction of Adiabatic Ionization Energies for PAHs and Substituted Analogues. *J. Phys. Chem. A* 2023, 127, 8447–8458.
- [2] Bourgalais, J., Carstensen, H.-H., Herbinet, O., Garcia, G.A., et al., Product Identification in the Low-Temperature Oxidation of Cyclohexane Using a Jet-Stirred Reactor in Combination with SVUV-PEPICO Analysis and Theoretical Quantum Calculations. *J. Phys. Chem. A* 2022, 126, 5784–5799.
- [3] Bourgalais, J., Smith Lewin, C., Herbinet, O., Garcia, G.A., et al., Refining the chain-branching process in the low-temperature oxidation of 1-hexene with synchrotron-based PEPICO spectroscopy. *Combustion and Flame* 2023, 258, 113065.

V.14. 2022EMPPX2596 : Stockage de l'énergie thermique en Mousse Métallique avec matériaux à changement de phases

Responsable : KHEIRI Abdelhamid

Laboratoire LEMTA, Vandœuvre-lès-Nancy

Le projet se concentre sur l'étude du comportement d'un système de stockage d'énergie thermique (TES) avec un matériau à changement de phase (PCM) seul, avec intégration d'ailettes ou avec mousses métallique. Une validation du modèle numérique est effectuée en comparant l'évolution temporelle de la fraction liquide, calculée numériquement et déterminée à partir des mesures des champs de température. La validation est faible pour les différentes configurations (sans ou avec ailettes) et les résultats permettent de comprendre les mécanismes de transfert dans le milieu.

Publications:

- [1] Abderrahmane El Hanafi, Nicolas Blet, Abdelhamid Kheiri, Benjamin Rémy. Numerical investigation of a thermal energy storage with phase change material under periodic boundary conditions. AIP Conference Proceedings, 2023, AMT2022: The 7th International Congress On Thermal Sciences, 2761, pp.060005. hal-04233631
- [2] Abderrahmane El Hanafi, Nicolas Blet, Abdelhamid Kheiri, Benjamin Remy. Study of the thermal dynamic behavior of a tes system with pcm in a rectangular enclosure. 17th International Heat Transfer Conference, Aug 2023, Cape Town, South Africa. pp.2377. hal-04442772
- [3] Abderrahmane El Hanafi, Nicolas Blet, Abdelhamid Kheiri, Benjamin Rémy. Étude du stockage/déstockage cyclique de l'énergie thermique par Matériaux à Changement de Phase dans une enceinte rectangulaire. Congrès de la Société Française de Thermique, May 2023, Reims, France. hal-04157882

V.15. 2022EMPPX2729 : Recherche de solvants verts pour des applications en biotechnologie : Étude par modélisation moléculaire

Responsable : CHEBIL Latifa

Laboratoire Réactions et Génie des Procédés (LRGP), UMR 7274 CNRS, Université de Lorraine

Les trois dernières années ont vu l'émergence d'un certain nombre de variantes de champs de force améliorées qui ont été créées pour adapter les mélanges eutectiques profonds (MEP), permettant d'étudier les effets de l'hydratation et de la liaison hydrogène, une propriété considérée comme cruciale pour la solvation et les applications des MEP.

Ainsi, les objectifs de ce projet sont : i) identifier les milieux eutectiques profonds les plus performants pour la solubilisation de deux familles de biomolécules (acides aminées et polyphénols), ii) Étudier les interactions enzyme immobilisée/substrat lors des réactions d'estérification, dans les MEP. Pour répondre à ces objectifs, une double approche de modélisation et expérimentale sera déployée. L'approche de modélisation moléculaire consistera à étudier les interactions entre les différents composés du MEP et les biomolécules, estimer les énergies libres de solvation et la solubilité des biomolécules. La dynamique moléculaire sera utilisée dans ce cas et les différents paramètres du champ de force OPLS (Optimized Potentials for Liquid Simulations) seront adaptés pour les mélanges étudiés. L'approche expérimentale viendra compléter/valider les résultats issus de la dynamique moléculaire. Des méthodes telles que la spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (FTIR) ou la titration calorimétrique isotherme seront utilisées.

V.16. 2022EMPPX2737 : Dynamique des polluants particulaires dans un habitacle automobile

Responsable : TANIÈRE Anne

Laboratoire LEMTA, Vandœuvre-lès-Nancy

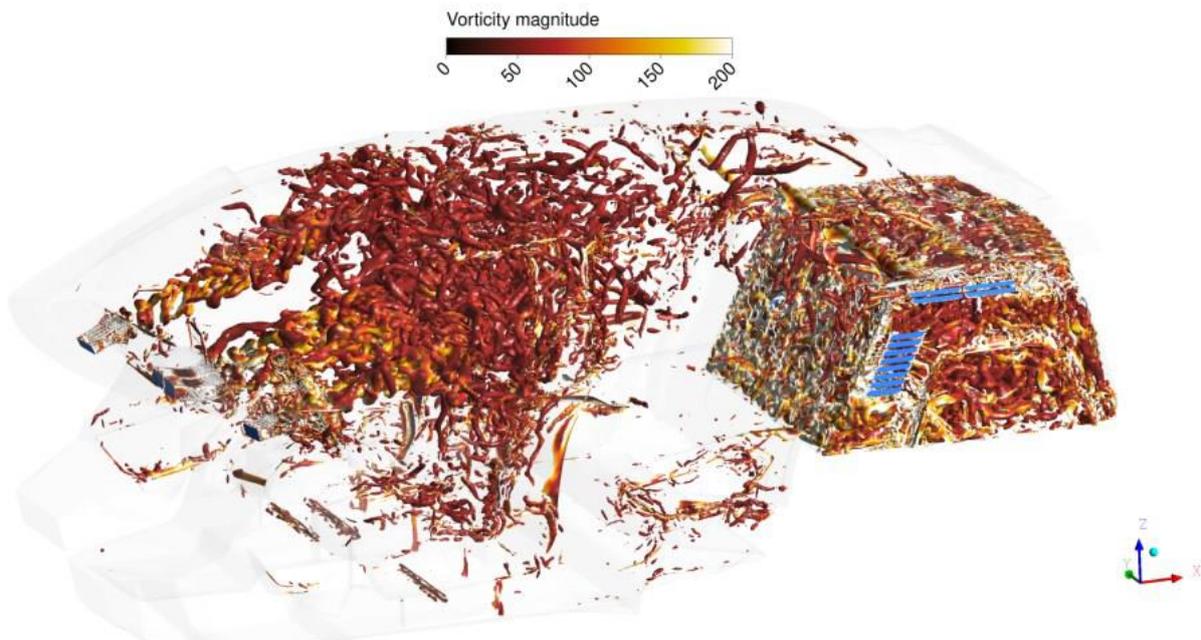


Figure. Visualisation des structures tourbillonnaires au travers du critère Q coloré par la vorticité ($Q \sim 480 \text{ s}^{-2}$).

Le projet de calcul entrepris sur le serveur EXPLOR consiste à réaliser une simulation LES de l'aérodynamique d'un habitacle automobile à échelle réelle. L'objectif est de modéliser un écoulement turbulent diphasique avec une phase porteuse (l'air) et une phase dispersée (les polluants particulaires), en adoptant une approche Euler-Euler. Les simulations sont toujours en cours et les résultats finaux sont prévus pour la fin de cette année.

Publications:

Une publication des résultats en lien avec ce projet est en cours.

V.17. 2023EMPPX2942 : Simulation de l'ablation thermique d'un solide par un jet liquide

Responsable : GRADECK Michel

Laboratoire LEMTA, Vandœuvre-lès-Nancy

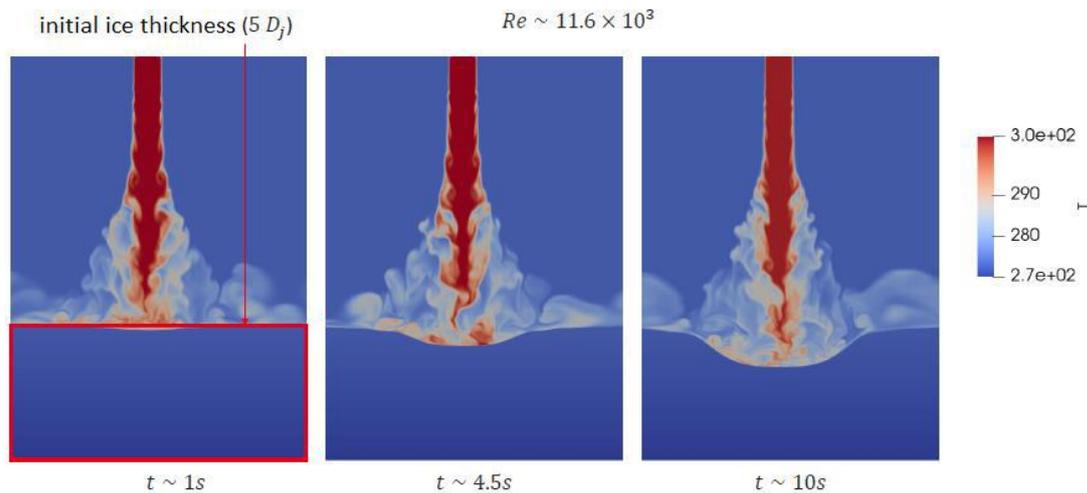


Figure. exemple d'évolution de la cavité obtenue numériquement

Il s'agit d'étudier l'ablation d'une paroi solide par un jet chaud. Dans un premier temps, on étudiera le phénomène avec des corps purs de même nature en l'occurrence de l'eau et de la glace avec une seule température de changement d'état solide-liquide. Le problème est multiphasique et est numériquement ardu dans la zone de fonte où de forts gradients de température, de densité, de vitesse sont présents

Publications:

- [1] A. Avrit, M. Gradeck, N. Rimbert, A. Lecoanet, N. Seiler, Ablation of a solid by a circular immersed or free surface jet, The 11th International Conference on Multiphase Flow, Kobe International Conference Center, Kobe Japan, April 27, 2023
- [2] A. Avrit, N. Seiler, A. Lecoanet, A. Djermoune, N. Rimbert, M. Gradeck, Experimentation & simulation of ablated surface by jet impingement for core catcher safety issue, The 11th European Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR2024), Stockholm (Sweden)

V.18. 2023EMPPX3020 : Dessalement solaire autonome à faible maintenance destinée à des fins domestiques et agricoles

Responsable : KHALIJ Mohammed

Laboratoire LEMTA, Vandœuvre-lès-Nancy

La collaboration entre plusieurs institutions, incluant des laboratoires en France, au Maroc et en Tunisie, se concentre sur le dessalement solaire des eaux saumâtres, bénéficiant d'un financement de Campus France via le Partenariat Hubert Curien (PHC Maghreb). L'objectif majeur est d'augmenter la production d'eau douce dans la région du Maghreb en exploitant les ressources solaires abondantes et les réserves d'eau salée. Pour ce faire, un Humidificateur-Déshumidificateur (HDH) solaire couplé à un capteur solaire thermique est étudié pour concevoir une installation optimisée, visant à augmenter la production d'eau douce tout en réduisant la consommation énergétique.

Les recherches se concentrent sur l'intensification des échanges de matière et de chaleur dans le HDH pour surmonter les intermittences climatiques. Des techniques telles que la pulvérisation d'eau et l'injection de bulles d'air sont utilisées pour améliorer les échanges interfaciaux entre l'eau salée et l'air humide à condenser, augmentant ainsi le rendement du dessalement. Des études expérimentales et numériques ont montré l'efficacité de ces méthodes, mais des recherches supplémentaires sont nécessaires pour comprendre les raisons sous-jacentes des effets contreproductifs potentiels, comme la diminution de l'humidité absolue à des niveaux élevés de pulvérisation.

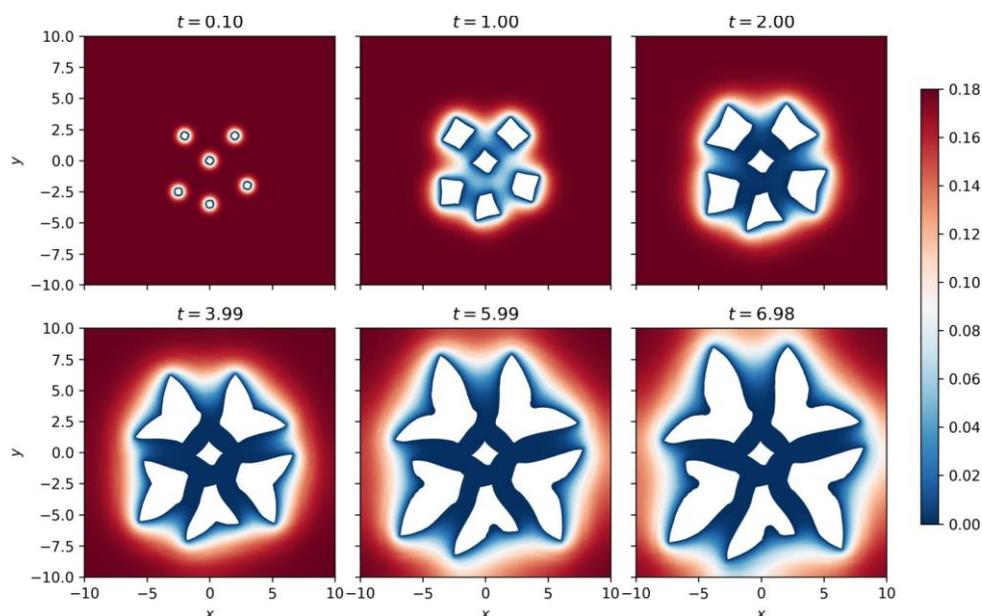
De plus, une analyse détaillée de la dynamique de l'écoulement diphasique liquide/gouttelettes est entreprise pour comprendre son impact sur la performance du dessaleur. Ces travaux de recherche visent à perfectionner les techniques de dessalement solaire et à surmonter les défis techniques pour garantir une production d'eau douce durable dans la région du Maghreb.

**VI. Pôle scientifique
Matière, Matériaux,
Métallurgie, Mécanique
(M4)**

VI.1. 2017M4XXX0312 : Modélisation mésoscopique de la solidification dendritique

Responsable : ZALOŽNIK Miha

Institut Jean Lamour, Nancy



Pendant la solidification des alliages métalliques différents phénomènes physiques sont couplés à travers une large gamme d'échelles (7 ordres de grandeur). Il y a un manque de connaissances sur l'échelle associée aux interactions collectives entre grains cristallins – dite mésoscopique (mm–cm). Le développement d'outils pertinents et performants qui peuvent traiter cette échelle est assez récent (années 2010). Nous travaillons sur le modèle mésoscopique d'enveloppe de grain (Grain Envelope Model – GEM) qui permet maintenant de modéliser cette échelle de manière quantitative. Nous travaillons également sur le changement d'échelle mésoscopique \rightarrow macroscopique vers les modèles de procédé métallurgique (coulée à l'échelle industrielle).

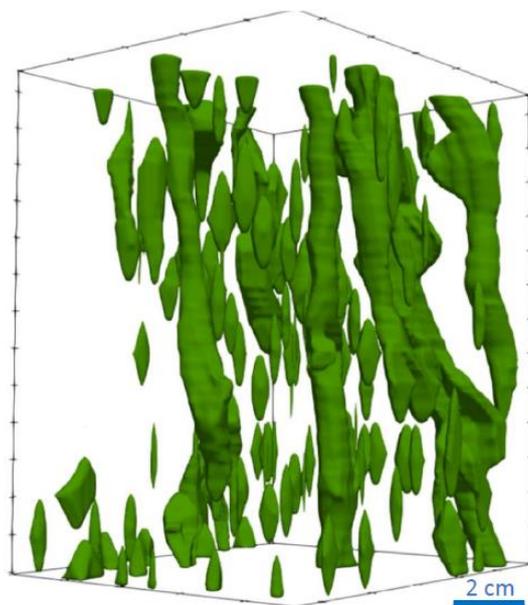
Publications:

- [1] A. K. Boukellal, M. Založnik, J.-M. Debierre, Multi-scale modeling of equiaxed dendritic solidification of Al-Cu at constant cooling rate, IOP Conference Series : Materials Science and Engineering 1281 (1) (2023) 012048. doi:10.1088/1757-899X/1281/1/012048.
- [2] M. Jančič, M. Založnik, G. Kosec, A sharp-interface mesoscopic model for dendritic growth, IOP Conference Series : Materials Science and Engineering 1274 (1) (2023) 012046. doi:10.1088/1757-899X/1274/1/012046.
- [3] M. Jančič, M. Založnik, G. Kosec, Meshless interface tracking for the simulation of dendrite envelope growth, Journal of Computational Physics in press (2024). doi:10.1016/j.jcp.2024.112973.
- [4] A. Chirouf, B. Appolaire, A. Finel, Y. L. Bouar, M. Založnik, Investigation of diffusive grain interactions during equiaxed dendritic solidification, IOP Conference Series : Materials Science and Engineering 1281 (1) (2023) 012054. doi:10.1088/1757-899X/1281/1/012054.

VI.2. 2017M4XXX0313 : Modélisation multi-échelles des procédés de coulée

Responsable : ZALOZNIK Miha

Institut Jean Lamour, Nancy



La complexité des procédés de coulée des alliages métalliques réside dans le couplage important entre thermique, convection, rhéologie de la zone pâteuse et solidification. Le modèle multi-échelles développé à l'IJL nous permet d'étudier ces couplages, avec un intérêt particulier pour les macrostructures (distribution de la taille et de la texture des grains cristallins) et les variations de compositions en élément d'alliage (ségrégations chimiques). Le modèle consiste des équations de transport (éDP) qui décrivent le transport de chaleur et de matière, couplées à un modèle de la cinétique de croissance des grains cristallins pendant la solidification. Les logiciels développés sont industrialisés et servent au même temps à la recherche et à la simulation dans la R&D industrielle.

Publications:

- [1] M. Založnik, M. Cisternas Fernández, OpenSolid, Agence pour la protection des programmes, IDDN.FR.001.360006.000.S.P.2022.000.30635 (2022).
- [2] S. Sachi, Coupling solidification model with CALPHAD data for the prediction of macrosegregation and solidification structures, Theses, Université de Lorraine (May 2022). URL <https://hal.univ-lorraine.fr/tel-03797401>
- [3] L. Gutman, J. R. Kennedy, A. K. Boukellal, F. Roch, A. Marceaux dit Clément, M. Založnik, J. Zollinger, Modelling of spatial distribution of segregations in large steel ingots by analysis of centimetric segregation maps, IOP Conference Series : Materials Science and Engineering 1281 (1) (2023) 012061. doi:10.1088/1757-899X/1281/1/012061.
- [4] L. Gutman, J. R. Kennedy, F. Roch, A. Marceaux dit Clément, M. Založnik, J. Zollinger, Reconstruction en 3D de ségrégations par analyse de cartographies chimiques centimétriques, in : La Métallurgie, quel avenir !, Grenoble, France, 2023.

VI.3. 2018M4XXX0108 : Surfaces d'intermétalliques complexes : structure et réactivité

Responsable : GAUDRY Émilie

Institut Jean Lamour, Nancy

Principales thématiques traitées pendant la période :

- ZnO/ZnPd
- Nanoparticules In-Pd dans le cadre de financement FEDER
- Interfaces métal / oxide et quasicristaux oxides dans le cadre du financement LUE «international»
- Alliages de Heusler et machine learning dans le cadre du projet LUE interdisciplinarité
- Approximants quasicristallins oxides dans le cadre de l'ANR NOUS
- Calcul des énergies d'adsorption par machine learning
- Calcul de chemins réactionnels (hydrogenation de Single Atom Catalysts)

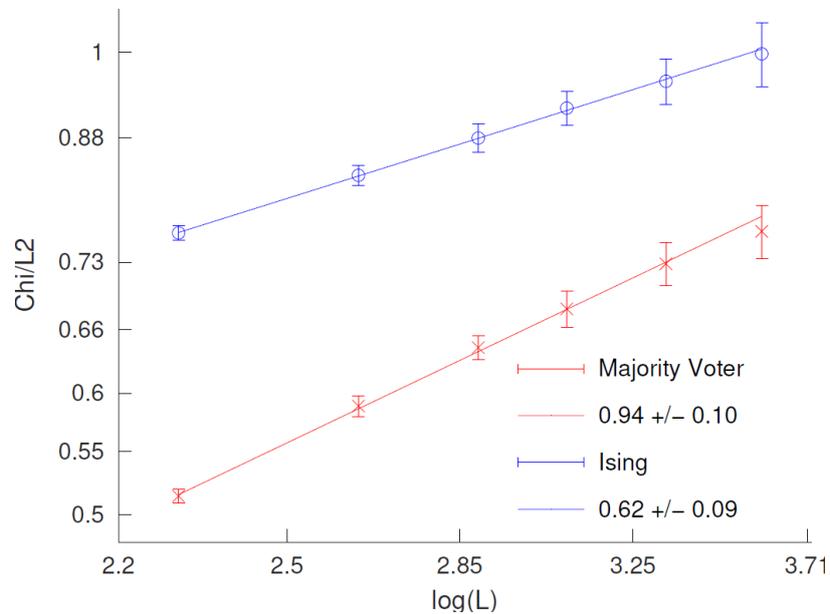
Publications :

- [1] J. E. Montoya Cardona, A. Salichon, N. Tarrat, E. Gaudry*, and D. Loffreda*, “Structural, Ordering and Magnetic Properties of PtNi Nanoalloys Explored by Density Functional Theory and Stability Descriptors”, *J. Phys. Chem. C* 127 (2023) 18043.
- [2] T. Ly Nguyen, Th. Mazet, E. Gaudry, D. Malterre, F. H. Chang, H. J. Lin, C. T. Chen, Y. C. Tseng, A. Chainani*, Crucial role of d-d Coulomb correlations in the magnetocaloric ferrimagnets $Gd_6(Mn_{1-x}Mx)_23$ (M=Fe,Co), *Phys. Rev. B* 109 (2024) 035102.
- [3] L. de Senna Junior, A. Pancotti, A. S. Kilian, A. de Siervo, R. D. Diehl, M.-C. de Weerd, J. Ledieu, E. Gaudry, V. Fournée, and G. J. P. Abreu*, “X-ray photoelectron diffraction study of the approximant $Al_5Co_2(001)$ quasicrystal”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 25 (2023) 3387-3394.
- [4] M. Sicot, E. Gaudry, D. Pierre, Y. Lu, S. Mangin, and O.Kurnosikov*, “Bringing depth to scanning tunnelling microscopy: subsurface vision of buried nanoobjects in metals”, *Nanoscale Horizons* 2023.
- [5] C. Chatelier, K. Anand, P. Gille, M.-C. De Weerd, J. Ledieu, V. Fournée, A. Resta, A. Vlad, Y. Garreau, A. Coati, É. Gaudry*, “Revealing the Epitaxial Interface between $Al_{13}Fe_4$ and Al_5Fe_2 Enabling Atomic Al Interdiffusion”, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 15 (2023) 19593-196032023.
- [6] A. Ormeci, E. Gaudry, M. Armbrüster, Y. Grin*, “Chemical Bonding in the Catalytic Platform Material $Ga_{1-x}Sn_xPd_2$ ”, *ChemistryOpen* 2022, 11, e202200185.
- [7] A. Bhattacharyya, M. R. Lees, K. Panda, P. P. Ferreira, T. T. Dorini, E. Gaudry, L. T. F. Eleno, V. K. Anand, J. Sannigrahi, P. K. Biswas, R. Tripathi, and D. T. Adroja, “Nodeless time-reversal symmetry breaking in the centrosymmetric superconductor $Sc_5Co_4Si_{10}$ probed by muon-spin spectroscopy”, *Phys. Rev. Materials* 6, 064802 (2022).
- [8] P. Boulet,* M.-C. de Weerd, E. Gaudry, S. Sturm, J. Zollinger, J.-M. Dubois, V. Fournée, and J. Ledieu, “ Al_4Ir : An Al-Ir Binary-Phase Superstructure of the Ni_2Al_3 Type”, *Inorg. Chem.* 2022, 61, 23, 8823–8833.
- [9] A. K. Shukla, J. Ledieu, E. Gaudry, D. M. Wu, T. A. Lograsso, and V. Fournée*, “Quantum size effects in Ag thin films grown on the fivefold surface of the icosahedral Al-Cu-Fe quasicrystal: Influence of the growth temperature”, *J. Vac. Sci. Technol. A* 40 (2022) 013212.

VI.4. 2018M4XXX0118 : Influence du désordre sur les transitions de phase quantiques

Responsable : CHATELAIN Christophe

Institut Jean Lamour, Nancy



Durant ces deux dernières années, nous avons étudié les propriétés critiques de différents modèles de spins, classiques et quantiques : les modèles de Potts et d'horloge quantiques désordonnés (thèse de Valentin Anfray), le modèle des électeurs majoritaires et un modèle de dimères en interaction.

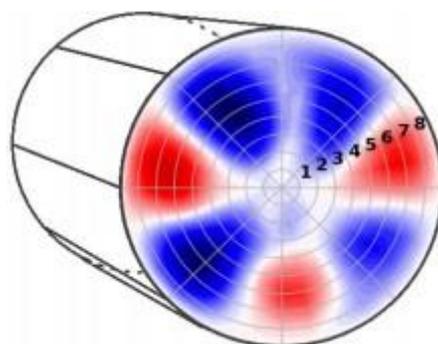
Publications:

- [1] [1] V. Anfray and C. Chatelain, Numerical Evidence of a Universal Critical Behavior of Two-Dimensional and Three-Dimensional Random Quantum Clock and Potts Models, *Phys. Rev. E* 108, 014124 (2023).
- [2] [2] C. Chatelain, Finite-Size Scaling of the Majority-Voter Model above the Upper Critical Dimension, *Condens. Matter Phys.* 26, 13202 (2023).
- [3] [3] C. Chatelain, CTMRG Study of the Critical Behavior of an Interacting-Dimer Model, arXiv:2401.14830.

VI.5. 2018M4XXX0251 : Turbulence de basse fréquence dans les plasmas de fusion

Responsable : LESUR Maxime

Institut Jean Lamour, Nancy



La fusion thermonucléaire est une source d'énergie propre, sûre, et abondante, mais dont la faisabilité requiert de débloquent certains jalons scientifiques. L'efficacité des futurs réacteurs de type tokamak (chambre magnétique à géométrie toroidale) dépend d'une bonne compréhension de la dynamique d'un plasma chaud magnétisé. En particulier, les ondes électromagnétiques et la turbulence induit un transport de particules et d'énergie entre le cœur et le bord du plasma. Les performances d'un réacteur seront particulièrement sensibles au transport d'énergie, et au transport d'impuretés telles que des particules de tungstène arrachées à l'enceinte par le plasma. La machine cylindrique SPEKTRE, dont la construction est en cours à l'IJL, permettra d'étudier plus en détail ce type de phénomènes. Dans ce projet, nous développons et utilisons des modèles numériques de ces plasmas, à différents niveaux de modélisation.

Publications:

- [1] [1] J. Moritz, S. Heurax, N. Lemoine, M. Lesur, E. Gravier, F. Brochard, L. Marot, P. Hirt, Thermionic emission of a tungsten surface in high heat flux plasma: PIC simulations, *Phys. Plasmas* 30, 083514 (2023).
- [2] [2] K. Lim, X. Garbet, Y. Sarazin, E. Gravier, M. Lesur, G. Lo-Cascio, T. Rouyer, Self-consistent gyrokinetic modeling of turbulent and neoclassical tungsten transport in toroidally rotating plasmas, *Phys. Plasmas* 30, 082501 (2023).
- [3] [3] A. Guillevic, M. Lesur, X. Garbet, P. Diamond, G. Lo-Cascio, Y. Kosuga, E. Gravier, D. Mandal, A. Ghizzo, T. Réveillé, Particle dynamics in a turbulent electric field, *Phys. Plasmas* 30, 052301 (2023).
- [4] [4] D. Mandal, M. Lesur, E. Gravier, J.N. Sama, A. Guillevic, Y. Sarazin, X. Garbet, Global linear stability analysis of kinetic Trapped Ion Mode (TIM) in tokamak plasma using spectral method, *Plasma Phys. Control. Fusion* 65, 055001 (2023).
- [5] [5] E. Gravier, T. Drouot, M. Lesur, A. Guillevic, G. Lo-Cascio, J. Moritz, D. Escande, G. Manfredi, Collision rates estimated from exact N-body simulations of a one-dimensional plasma, *Phys. Plasmas* 30, 012102 (2023).
- [6] [6] G. Lo-Cascio, E. Gravier, T. Réveillé, M. Lesur, Y. Sarazin, X. Garbet, L. Vermare, K. Lim, A. Guillevic, V. Grandgirard, Transport barrier in 5D gyrokinetic flux-driven simulations, *Nucl. Fusion* 62, 126026 (2022).

VI.6. 2018M4XXX0439 : Simulation numérique des procédés d'élaboration métallurgiques

Responsable : KROLL-RABOTIN Jean-Sébastien

Institut Jean Lamour, Nancy

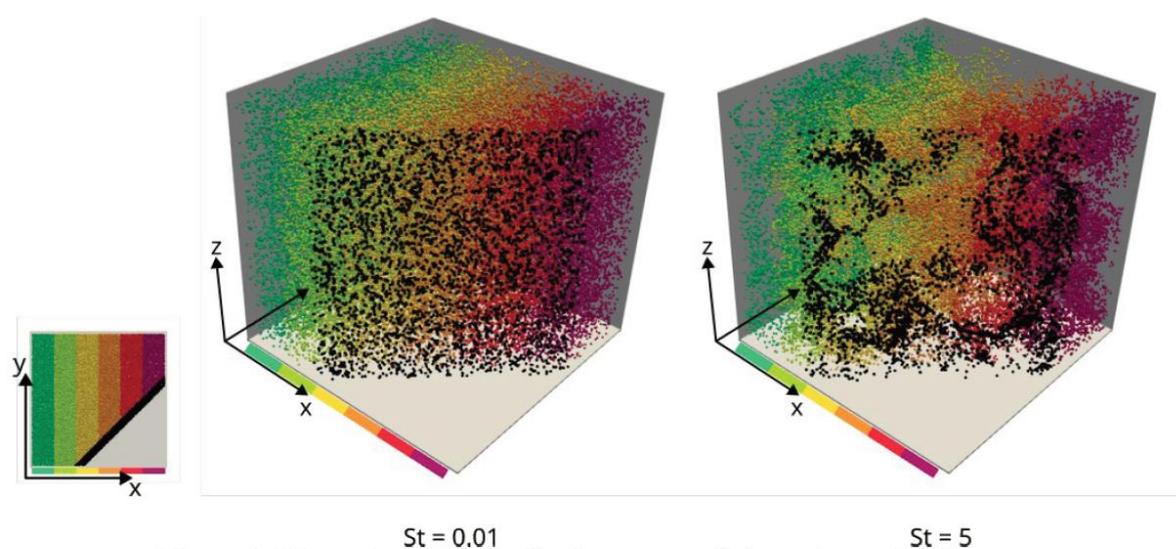


Figure 1: Dispersion de particules dans une turbulence homogène isotrope.

Parmi les travaux de l'équipe « Procédés d'Élaboration » de l'Institut Jean Lamour, un sujet d'étude important est le contrôle de la propreté inclusionnaire des alliages métalliques, conditionnée pendant l'étape d'élaboration en phase liquide. Dans ce contexte, une thèse a démarré en 2022 sur la simulation numérique du transport et de la capture d'inclusions pendant l'affinage. Cette thèse se focalise sur des configurations d'écoulements modèles afin de déterminer des lois quantitatives pour les mécanismes fondamentaux qui régissent le transport des inclusions, en vue d'implémenter ces modèles dans les futures simulations à l'échelle procédés menées dans l'équipe.

Publications:

- [1] Kroll-Rabotin, J.-S., Gisselbrecht, M., Joishi, M., Bellot, J.-P., 2023. Comportements locaux d'inclusions dans les réacteurs métallurgiques : agrégation et dépôt aux parois, Société Française de Génie des Procédés 2022. DOI: 10.1051/mateconf/202337902003.

VI.7. 2018M4XXX0593 : Modélisation ab initio des défauts dans les métaux et alliages Métalliques

Responsable : DEZERALD Lucile

Institut Jean Lamour, Nancy

Ce projet s'inscrit dans une démarche générale de modélisation multi-échelle des propriétés des matériaux à partir de l'échelle atomique. Nous réalisons des simulations à l'échelle atomique des matériaux et de leurs défauts cristallins dans l'objectif de mieux comprendre les mécanismes en jeu dans leurs propriétés mécaniques et/ou physico-chimiques aux échelles supérieures. Actuellement, nous travaillons en particulier sur la problématique du stockage de l'hydrogène dans les phases MAX, ainsi, nous calculons l'énergie d'insertion de H dans plusieurs phases MAX (Ti_3AlC_2 et Ti_3SiC_2) afin d'évaluer s'il existe une composition chimique qui favorise le stockage de H.

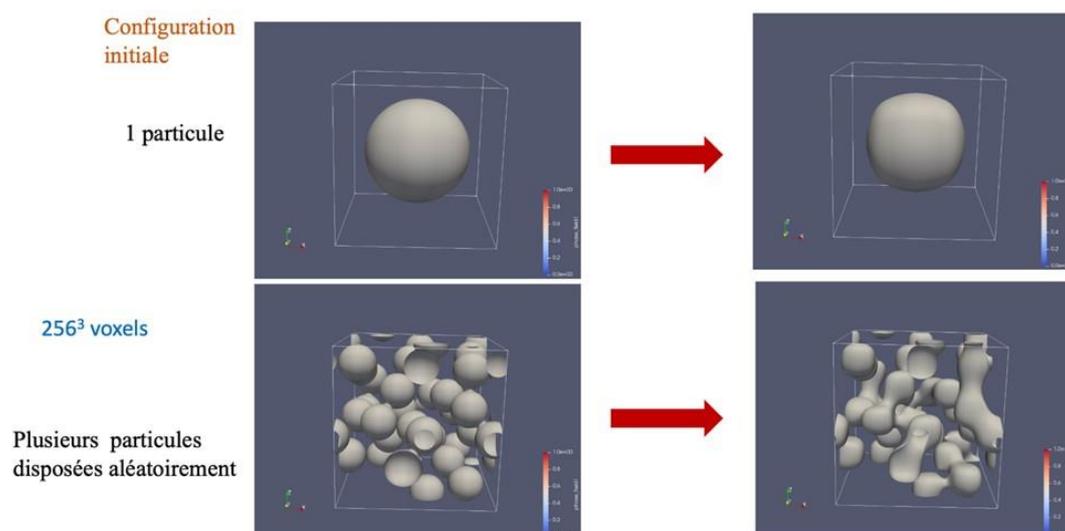
Publications:

- [1] Kharouji, H., Dezerald, L., Hirel, P., Carrez, P., et al., Atomistic to continuum mechanics description of crystal defects with dislocation density fields: Application to dislocations and grain boundaries. *International Journal of Plasticity* 2024, 177, 103990.

VI.8. 2018M4XXX0708 : Modélisation de diagrammes de diffraction de rayons X réalisés in situ par des méthodes numériques type FFT (Fast Fourier Transform)

Responsable : BERBENNI Stéphane

Laboratoire LEM3, Metz



Les superalliages monocristallins à base nickel sont des alliages constitués de deux phases : les précipités de forme cuboïdale γ' (Ni_3Al) de structure L12), généralement de forme cuboïdale, qui sont distribués dans la phase matrice γ (Ni) de structure cubique. Les paramètres de maille des deux phases à température ambiante sont légèrement différents permettant de calculer le désaccord paramétrique (« misfit » en anglais) δ défini par $\delta = 2(a_{\gamma'} - a_{\gamma}) / (a_{\gamma'} + a_{\gamma})$. La microstructure de ces matériaux évolue lorsqu'ils sont soumis à des sollicitations thermomécaniques. Les informations caractéristiques de l'état d'évolution de la microstructure sont obtenues au travers de l'enregistrement des profils de diffusion aux petits angles SAS (« Small Angle Scattering » en anglais) que nous simulons par une méthode FFT.

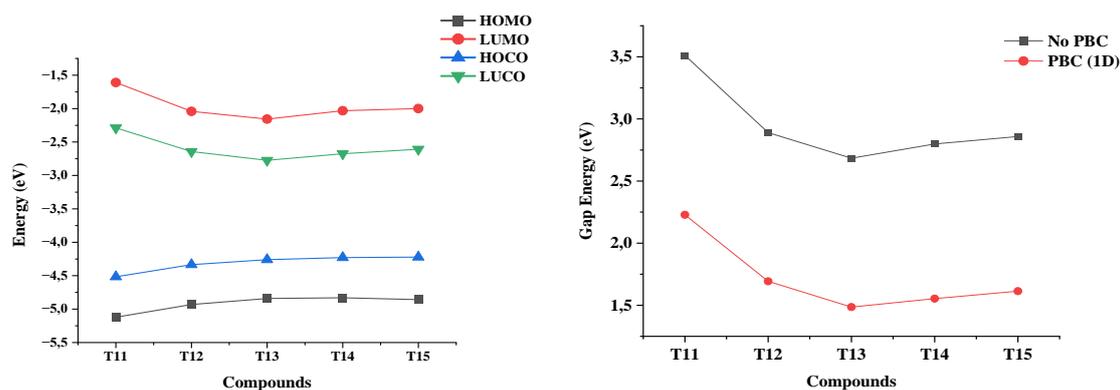
Publications:

- [1] A Massa, S Berbenni, T Schenk. Détermination de pics de diffraction aux faibles angles par FFT pour des microstructures cuboïdales de superalliages à base Nickel obtenues par la méthode de champ de phase. Colloque Plasticité 2023.
- [2] Massa, S Berbenni, T Schenk. Simulation of X ray diffraction peaks of single crystal superalloys. COLLOQUE NATIONAL MÉCAMAT 2023: Grandes transformations: aujourd'hui... demain.

VI.9. 2018M4XXX0868 : Etudes des relations structures-propriétés opto-électroniques de nouveaux matériaux organiques pour des applications en photovoltaïque

Responsable : MALOUFI Nabila

Laboratoire LEM3, Metz



Dans le cadre du sujet de thèse de doctorat, l'essentiel des travaux consistait à utiliser des logiciels se basant sur la théorie de fonctionnelle de la densité DFT afin de modéliser les propriétés opto-électroniques de certains matériaux organiques constitués de molécules volumineuses. L'utilisation des micro-ordinateurs au niveau du laboratoire L2MSM de Sidi Bel-Abbès, bien qu'assez puissants, ne permettait pas d'obtenir les résultats désirés. En coordination avec le laboratoire LEM3 de l'université de Lorraine et en collaboration avec le centre de calcul EXPLOR, nous avons pu réaliser de bons résultats. En effet, une série de molécules organiques basées sur les dérivées de thiophène comme électrodonneur et les dérivées de fullerène comme électro-accepteur ont été conçues dans le but d'améliorer le rendement des cellules photovoltaïques organiques. Les calculs des géométries et des structures électroniques de ces composés sont réalisés en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) au niveau de la théorie 6-31 G(d,p), basée sur la fonction B3LYP, dans le vide et la formulation de l'approximation du gradient généralisé de Perdew-Burke-Eenzerhof (PBE) dans les conditions aux limites périodiques (PBCs) en une (1D) et deux (2D) dimensions. Toutes les molécules présentent une bande interdite réduite, et des paramètres électroniques et optiques appropriés et favorables pour le domaine du photovoltaïque.

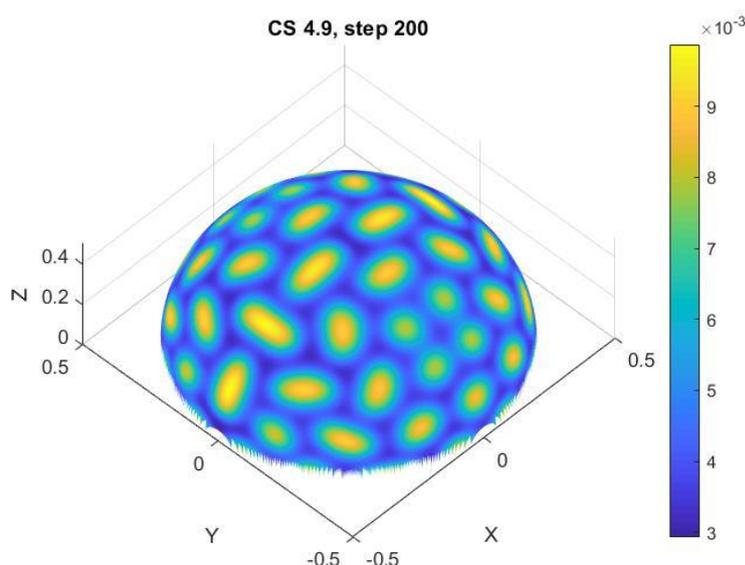
Publications :

Les publications sont en cours de réalisation, en attendant la finalisation des calculs à deux dimensions (2D).

VI.10. 2019M4XXX0954 : Simulations à l'aide d'un code FreeFem++ des systèmes film/substrat sphériques soumis à une contraction thermomécanique du cœur

Responsable : VENTURA Pascal

Laboratoire LEM3, Metz



La demande d'attribution de ressources informatiques concerne la simulation à l'aide de FreeFem++ des instabilités dans les systèmes film/substrat soumis à des sollicitations diverses en utilisant la Méthode des Eléments Finis (MEF) et la Méthode Asymptotique Numérique (MAN). La MAN est une méthode de continuation qui permet de résoudre aisément de nombreux problèmes non linéaires dépendant d'un paramètre en mécanique des solides ou des fluides. Fan Xu a appliqué la MAN pour simuler le comportement non linéaire des systèmes film/substrat sphériques soumis à une contraction thermomécanique du cœur des sollicitations en utilisant des éléments finis de type coque pour modéliser le film. Poursuivant ses travaux, et dans le but de mieux prendre en compte les instabilités de courte longueur d'onde, nous avons utilisé, la Méthode des Elements Finis (MEF) avec des éléments finis volumiques pour modéliser le film.

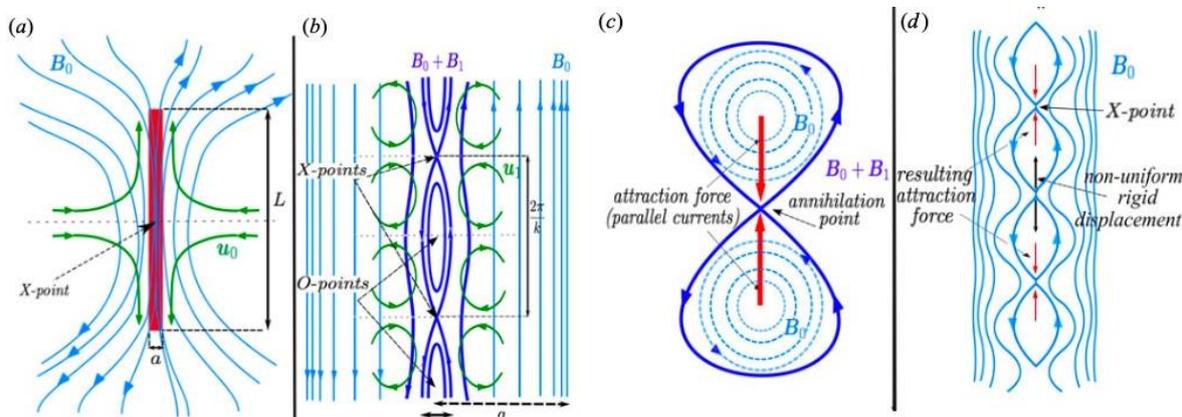
Publications :

En cours de publication d'un article intitulé : Nonlinear analysis of wrinkles in film-substrate systems by Finite Element Method and Asymptotic Numerical Method.

VI.11. 2019M4XXX0978 : Mechanisms of energy conversion in collisionless plasmas

Responsable : DEL-SARTO Daniele

Institut Jean Lamour, Nancy



But des investigations conduites en 2022 et 2023 dans le cadre de ce projet a été l'étude des processus de conversion d'énergie relatifs à trois types d'instabilités dans les plasmas sans collisions: **1)** Les instabilités de reconnexion magnétique (modes de cisaillement, ou « tearing modes »), qui déterminent un important transfert d'énergie de la composante magnétique à l'énergie cinétique des particules. Elles sont importantes dans les machines à confinement magnétique pour la fusion thermonucléaire (par ex. ITER), car elles peuvent détruire le confinement magnétique en empêchant l'achèvement des conditions de fusion, et dans une variété des processus en astrophysique – par exemple les éjections coronales dans le Soleil et les orages magnétiques en magnétosphère. **2)** Les instabilités d'anisotropie de pression (instabilités dites de type « Weibel »), qui amplifient les champs magnétiques aux dépenses de l'énergie cinétique stockée dans l'anisotropie en température ou dans les vitesses des faisceaux d'électrons dans les plasmas. Ces instabilités sont d'intérêt à la fois pour les interactions laser-plasmas et pour les expériences de fusion thermonucléaire à confinement inertiel (ex., l'installation APOLLON), et pour les plasmas dans l'astrophysique (faisceaux d'électrons accélérés dans les novae ou près des objets massifs comme trous noirs et étoiles de neutrons) et dans les plasmas d'espace (par ex., le vent solaire). **3)** Les instabilités liés aux « geodesic acoustic modes » (GAMs), qui sont des oscillations de la densité (et du champs électrique) du plasma, associés à la géométrie du dispositif de confinement. Dans leur interaction avec la turbulence des tokamaks, les GAMs peuvent jouer un rôle clé dans la suppression du transport turbulent, et donc dans la maintenance des conditions de confinement nécessaires à l'achèvement des conditions de fusion thermonucléaire par confinement magnétique.

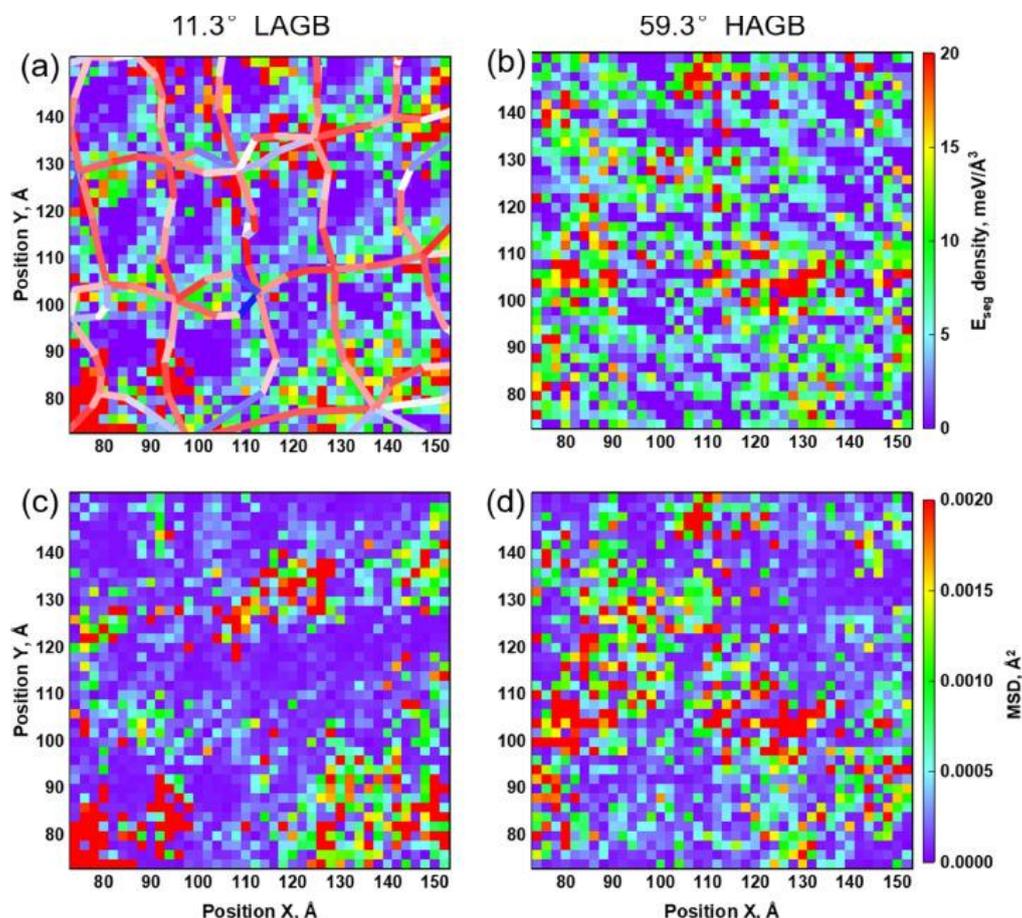
Publications:

- [1] "Microscopic scales of linear tearing modes: a tutorial on boundary layer theory for magnetic reconnection", H. Betar, D. Del Sarto, M. Ottaviani, A. Ghizzo, J Plasma Phys. 86, S0022377822001088 (2022).
- [2] "Effect of temperature anisotropy on the dynamics of geodesic acoustic modes", J.N. Sama, A. Biancalani, A. Bottino, I. Chavdarovski, D. Del Sarto, A. Ghizzo, T. Hayward-Schneider, Ph. Lauber, B. Rettino, F. Vannini, J. Plasma Phys. 89, 905890109 (2023).

VI.12. 2020M4XXX1595 : Étude atomistique des défauts dans les cristaux

Responsable : GUENOLE Julien

Laboratoire LEM3, Metz



A l'aide de simulation atomistique de type dynamique moléculaire, nous avons étudié les mécanismes de la plasticité dans un alliage de magnésium et dans l'intermétallique Mg₂Ca (Laves phase). Dans l'alliage de magnésium, nous avons caractérisé le caractère inhomogène de la ségrégation d'éléments d'alliages aux joints de grain de grand angle. Pour la phase de Laves, nous avons pour la première fois décrit précisément les mécanismes de propagation de la plasticité, ainsi que son caractère thermiquement activé.

Publications:

- [1] Atomistic insights into the inhomogeneous nature of solute segregation to grain boundaries in magnesium, R Pei, Z Xie, S Yi, S Korte-Kerzel, J Guénoilé, T Al-Samman, Scripta Materialia 230 (2023) 115432
- [2] Unveiling the mechanisms of motion of synchro-Shockley dislocations in Laves phases Z Xie, D Chauraud, A Atila, E Bitzek, S Korte-Kerzel, J Guénoilé, Physical Review Materials 7 (2023) 053605
- [3] Thermally activated nature of synchro-Shockley dislocations in Laves phases, Z Xie, D Chauraud, A Atila, E Bitzek, S Korte-Kerzel, J Guénoilé, Scripta Materialia 235 (2023) 115588

VI.13. 2021M4XXX2438 : Numerical study of the role of « macrozones » in alpha-beta titanium alloys

Responsable : BERBENNI Stéphane

Laboratoire LEM3, Metz

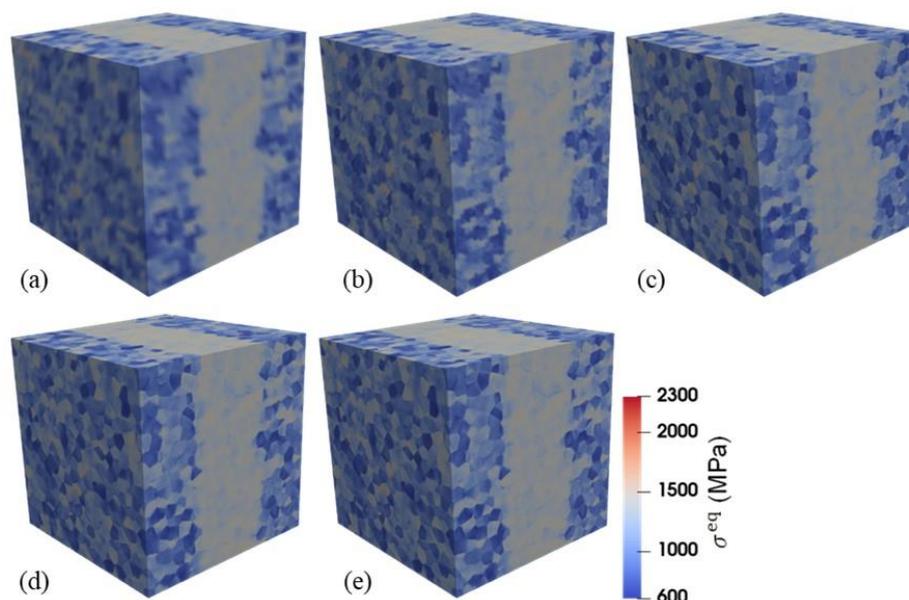


Figure. 3D view of the equivalent stress at the yield point for the morphology laminate x with the volume fraction 40% and the textures of x intense for (a) 32 3, (b) 64 3, (c) 128 3, (d) 256 3 and (e) 512 3 voxels.

Titanium alloys exhibit complex microstructures containing heterogeneities at different length scales. The microtextured regions with the same or nearly the same crystallographic orientation, also called “macrozones”, are known to have a detrimental influence on the alloy performance under cyclic loadings. Recent studies evidenced an effect of the degree of microtexture on the yield strength of polycrystalline aggregates. In the present study, fast Fourier transforms-based crystal elasto-viscoplastic (EVPFFT) numerical simulations of the macroscopic response of large 3D aggregates containing macrozones with different shapes, sizes and orientation are performed. Both macroscale response, microscale stress and strain fields are found affected by the presence of macrozones and their features.

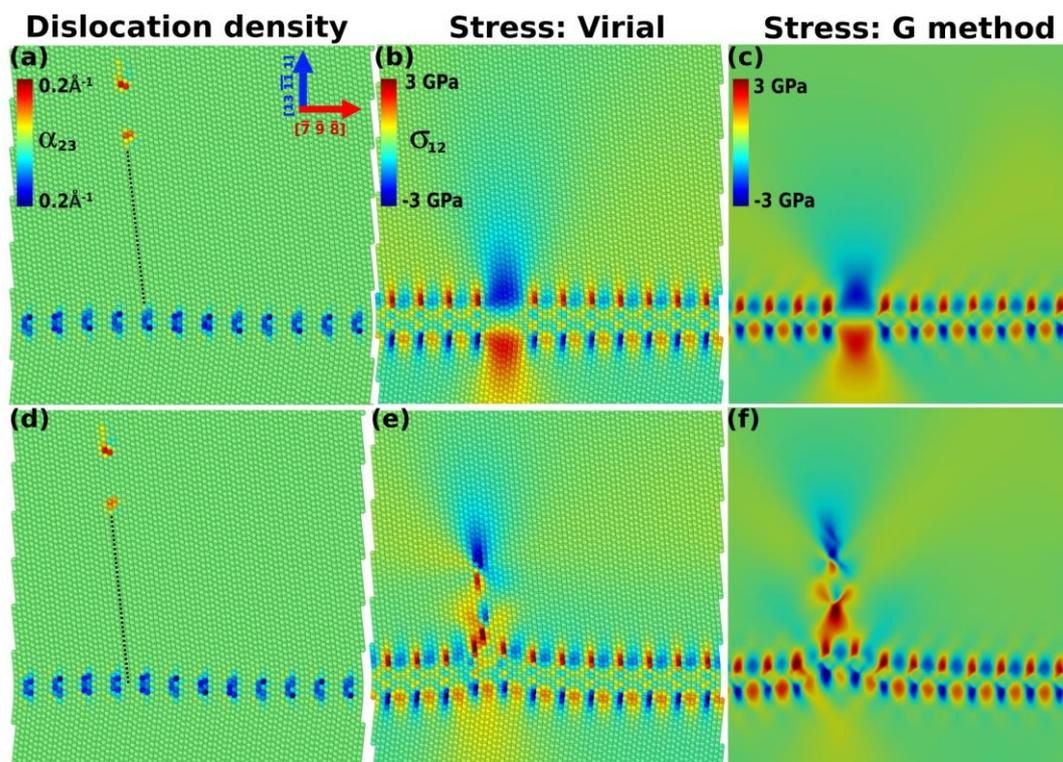
Publications:

- [1] Xiaolei Chen, Lionel Germain, Stéphane Berbenni. Hierarchy of the macrozone features in Ti-6Al-4V alloy inferred from massive polycrystal plasticity calculations. *Journal of Materials Research and Technology* Volume 29, March–April 2024, Pages 2468-2482 <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2024.02.014>

VI.14. 2021M4XXX2481 : Caractérisation discrète à l'échelle atomique de la plasticité aux interfaces dans les alliages complexes légers et transfert vers des modèles de continuum

Responsable : GUENOLE julien

Laboratoire LEM3, Metz



Par dynamique moléculaire, nous avons caractérisé à l'échelle atomique la structure de défauts dans des matériaux FCC et BCC. Nous avons utilisé une description en densité de tenseur de Nye pour réaliser avec succès le passage de la description défauts du discret au continu. En effet, les simulations de Mécanique des Champs de Dislocations (FDM) résolu par méthodes FFT montrent des champs mécaniques (contraintes, rotation...) quasi identiques à ceux prédit par la Dynamique Moléculaire.

Publications:

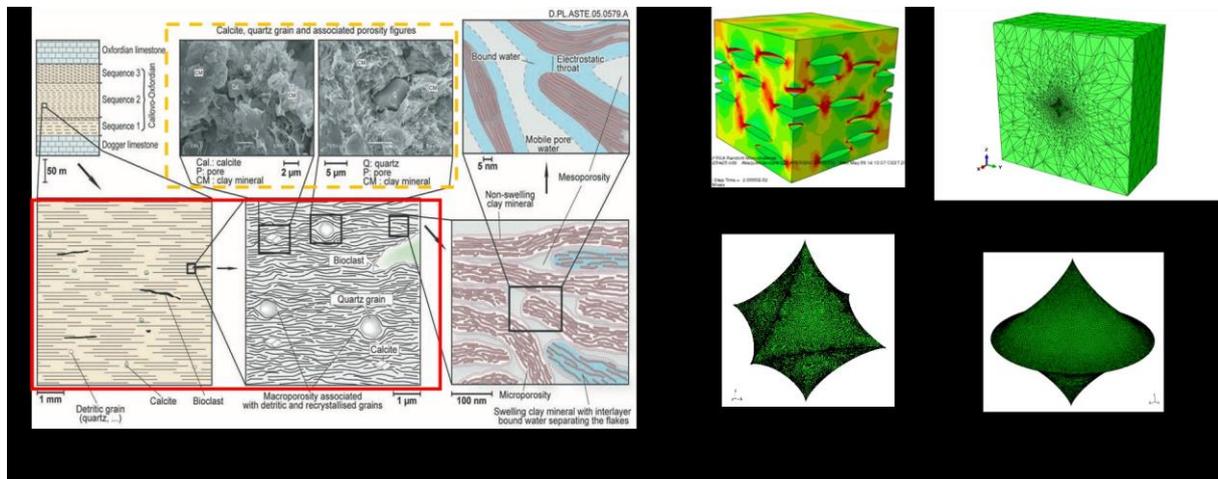
- [1] Houssam Kharouji, Lucile Dezerald, Pierre Hirel, Philippe Carrez, Patrick Cordier, Vincent Taupin, Julien Guénolé. Atomistic to continuum mechanics description of crystal defects with dislocation density fields: application to dislocations and grain boundaries. 2024. (hal-04471501v2)

**VII. Pôle scientifique
Observatoire Terre et
Environnement de Lorraine
(OTELO)**

VII.1. 2018OTELO0519 : Modélisation micromécanique de géomatériaux avec des microstructures complexes

Responsable : CHENG Long

Laboratoire GeoRessources, Vandœuvre-lès-Nancy



Un verrou scientifique important en mécanique des géomatériaux et des structures est la description des propriétés et comportements macroscopiques en relation avec les évolutions de microstructures poreuses et/ou fissurées. C'est notamment le cas pour des géomatériaux poreux composites (e.g. roches) qui sont généralement le siège de mécanismes de phénomènes d'endommagement liés à des évolutions de la microfissuration et de la porosité. Un prototype de géomatériau concerné est l'argilite du Callovo-Oxfordien, roche hôte retenue par les autorités françaises pour l'étude de la faisabilité d'ouvrages de stockage souterrain de déchets à haute activité et à vie longue. La compréhension fine du comportement mécanique de ces roches anisotropes, en relation avec leur perméabilité, est de manière générale cruciale dans ce contexte. A cette fin, on applique principalement dans ce projet la méthode d'homogénéisations numériques et théoriques à la modélisation micromécanique du matériau ciblé. Il s'agit d'une approche qui permet d'exploiter les informations microstructurales pour déterminer les propriétés macroscopiques en résolvant un problème sur le Volume élémentaire Représentatif (VER).

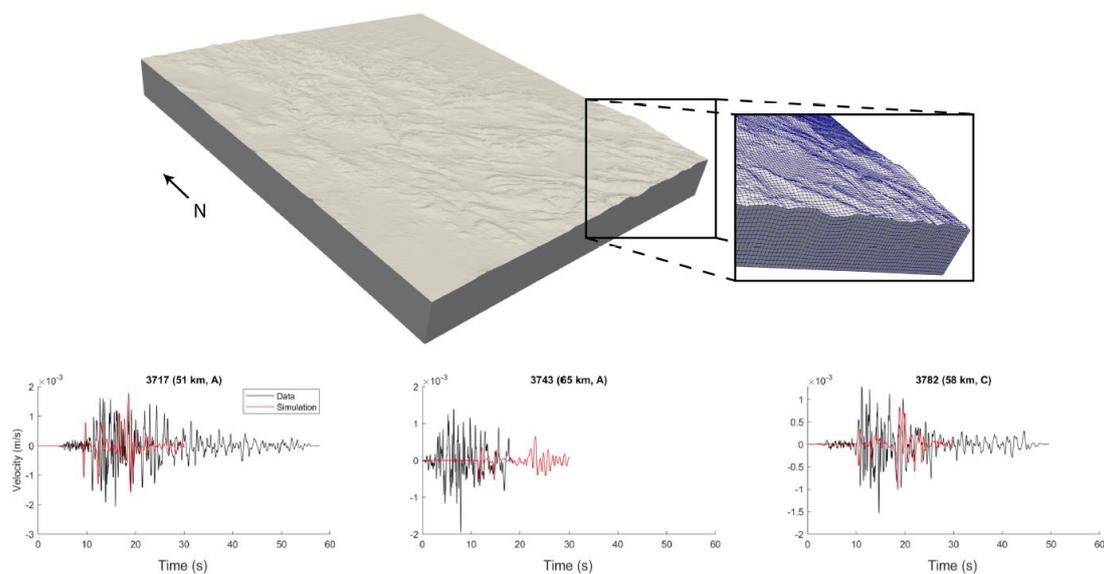
Publications:

- [1] Kou Du, Long Cheng, Jean-François Barthélémy, Igor Sevostianov, Albert Giraud, and Ayodele Adessina. Numerical Estimation of Resistivity Contribution Tensor of a Concave Pore Embedded in a Transversely Isotropic Matrix. *Advanced Structured Materials*, Volume 198 (2023), Chapter 5.
- [2] Kou Du, Long Cheng, Jean-François Barthélémy, Igor Sevostianov, Albert Giraud, and Ayodele Adessina. Effective Thermal Conductivity of Transversely Isotropic Materials with Concave Pores. *Advanced Structured Materials*, Volume 198 (2023), Chapter 6.
- [3] L. Cheng, S. Brach, D. Kondo, Numerical homogenization modeling of porous material with a general isotropic plastic matrix. Under submission

VII.2. 2020OTELO2019 : Simulation de propagation d'ondes sismiques

Responsable : CUPILLARD Paul

Laboratoire GeoRessources, Vandœuvre-lès-Nancy



Le projet s'inscrit dans le cadre d'une thèse réalisée au sein de l'équipe RING du laboratoire GeoRessources et intitulé Générateur stochastique de séismes en contexte de sismicité faible à modérée : des données à l'aléa. Cas des territoires français. Cette thèse a été soutenue en juin 2021. Pour la mener à bien, il a fallu compléter une base de données sismiques donnant l'accélération maximale du sol mesurées en différents points de la surface du continent européen par des données synthétiques issues de simulations numériques.

VII.3. 2022OTELO2524 : Simulation moléculaire par méthode monte carlo pour l'étude de comportements thermodynamiques des systèmes contenant SO₂ et NO à hautes pressions et hautes températures

Responsable : STERPENICH Jérôme

Laboratoire GeoRessources, Vandœuvre-lès-Nancy

Le projet consiste à acquérir des données thermodynamiques (solubilités) de gaz (SO₂, NO) dans l'eau en conditions de stockages géologiques de CO₂ (CCS). Les données sont acquises par spectrométrie Raman qui nécessite un calibrage à l'aide de données connues. Les données sur de tels gaz à haute pression et haute température sont inexistantes. On a donc procédé à des simulations Monte-Carlo de la solubilité de ces gaz afin de les comparer aux données de spectrométrie Raman et de, in fine, déterminer les nouvelles données de solubilité dans le système CO₂/SO₂/NO/eau (+ ou sel).

Publications :

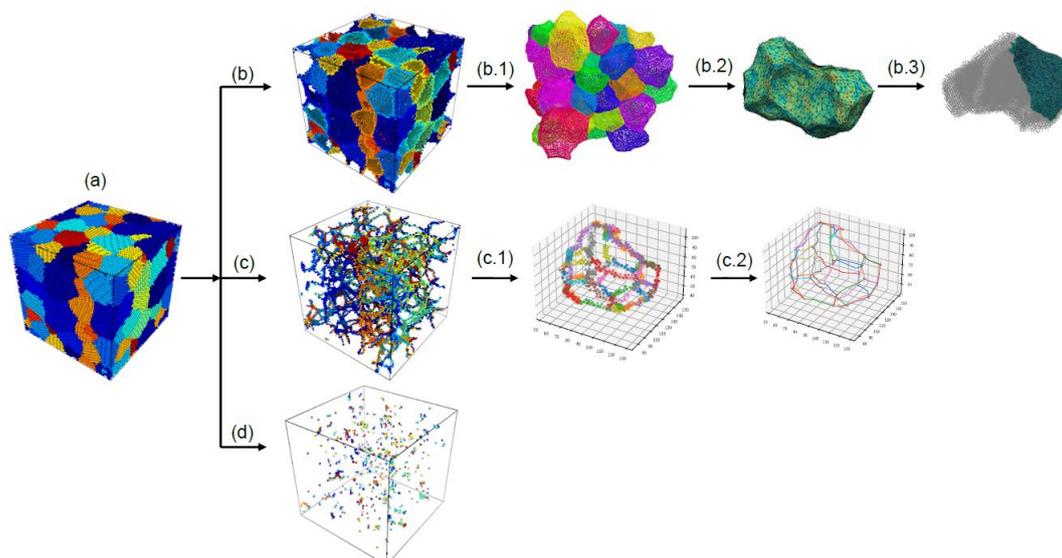
- [1] Saadallah, K., Lachet, V., Creton, B., Caumon, M. C., Randi, A., and Sterpenich, J. (2023) Solubility study of binary systems containing sulfur dioxide and water: A combination of Raman spectroscopy and Monte Carlo molecular simulation. *Fluid Phase Equilib.* 574, 113901.
- [2] Comportement thermodynamique des systèmes soufrés à haute pression et haute température. Approche expérimentale et numérique. Thèse Université de Lorraine par Khoulood Saadallah, 19/12/2023.

VIII. Autres

VIII.1. 2019EXTXX1184 : Atomistically Guided Alloy Design and Simulation of Microstructure Evolution

Responsible : BARRALES Luis

Georgia Tech - CNRS UMI 2958 - Metz



Molecular dynamics (MD) simulations were employed to simulate grain boundary migration and grain growth in nanocrystalline Al. The results of these simulations allowed the determination of the conditions under which one can expect a linear dependence of the velocity with the curvature. Furthermore, AI was employed to determine the mechanisms of migration under the action of different driving forces in bicrystalline specimens. At the mesoscopic scale, a cellular automaton model was implemented and used to simulate the microstructure evolution during additive manufacturing of a high manganese steel. Additionally, a crystal-plasticity finite element model (CP-FEM) was modified and employed to predict the mechanical properties of INCONEL at elevated temperatures.

Publications :

- [1] GB Bizana, LA Barrales-Mora, Kinetics of grain boundary migration in nanosized Al polycrystals. *Acta Materialia* 260, 119261.
- [2] JE Brandenburg, LA Barrales-Mora, S Tsurekawa, DA Molodov. Dynamic behavior of grain boundaries with misorientations in the vicinity of $\Sigma 3$ coherent and incoherent twin boundaries in Al bicrystals. *Acta Materialia* 259, 119272.
- [3] GB Bizana, LA Barrales-Mora, 3D grain growth in nanocrystalline Al via molecular dynamics: Influence of size, topology and integral mean curvature on grain kinetics. *Computational Materials Science* 219, 112009.
- [4] Jialiang Chen, Jinghao Xu, Johan Moverare, Luis A. Barrales-Mora, Effect of the building direction on the high-temperature mechanical properties of an IN738LC superalloy processed by laser-powder bed fusion. Submitted to *Materials Science and Engineering A*.
- [5] A. Singh, C. Haase and L.A. Barrales-Mora, Efficient cellular automaton model for the simulation of microstructure development during additive manufacturing. In preparation.