

explor modéliser
simuler
analyser



**UNIVERSITÉ
DE LORRAINE**

Synthèse des Comptes Rendus des projets actifs pour la période 2024 - 2025

Septembre 2025

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
III. Pôle scientifique Biologie, Médecine, Santé (BMS)	7
III.1. 2020BMSXX2165 : Etude de protéines par MD	8
III.2. 2018BMSXX0632 : Étude des protéines du systèmes Sulfazécine	9
III.3. 2022BMSXX2616 : Etude par dynamique moléculaire des méga-enzymes PKS.....	10
IV. Pôle scientifique Chimie et Physique Moléculaire (CPM)	11
IV.1. 2017CPMXX0085 : Application du calcul DFT pour l'interprétation des spectres RMN et IR.....	12
IV.2. 2021CPMXX2483 : Etude des interactions à trou sigma	13
IV.3. 2019CPMXX0886 : Calculs séquentiels rapides en physique et chimie	14
IV.1. 2019CPMXX0918 : Dynamique de réseau des cristaux mixtes semi-conducteurs.....	15
IV.2. 2018CPMXX0851 : Modélisation de la structure et des propriétés vibrationnelles d'hydroxydes doubles lamellaires.....	16
IV.3. 2017CPMXX0277 : Interactions moléculaires et simulation de systèmes moléculaires en phase condensée.....	17
IV.4. 2018CPMXX0602 : Effects of Self Aggregation on Perylenes Optical Properties.....	18
IV.5. 2019CPMXX0983 : Moving Under the Light	19
IV.6. 2020CPMXX2162 : Calcul de la compressibilité dans le CO ₂ supercritique.....	21
IV.7. 2022CPMXX2687 : Enumération de conformations de protéines à l'aide d'une approche Branch-and-Prune	22
IV.8. 2024CPMXX3385 : Factorisation exacte pour la dynamique a plusieurs dimensions.....	23
V. Pôle scientifique Énergie, Mécanique, Procédés, Produits (EMPP).....	24
V.1. 2017CPMXX0294 : Structure électronique des matériaux par calcul ab initio	25
V.2. 2017EMPPX0195 : Computations of the thermoelectric materials	26
V.3. 2017EMPPX0357 : Etude du mouvement des fumées issues d'un incendie dans un tunnel....	27
V.4. 2018EMPPX0394 : Simulation numérique du rayonnement thermique dans des mélanges de gaz de combustion	28
V.5. 2018CPMXX0429 : Etude du facteur d'échelle du code crystal sur des mailles à plus de 250 atomes.....	29
V.6. 2018EMPPX0691 : Un solver open source de type cut-cells	30

V.7. 2018EMPPX0815 : Simulation DNS d'écoulements turbulents chargés en particules solides ellipsoïdales.....	31
V.8. 2020EMPPX2087 : Modélisation multi-échelle des réservoirs de gaz de charbon	32
V.9. 2022EMPPX2737 : Qualité de l'air	33
V.10. 2023EMPPX3020 : Dessalement solaire autonome à faible maintenance destinée à des fins domestiques et agricoles	34
V.11. 2021EMPPX2491 : Modélisation cinétique détaillée des procédés pour l'énergie et l'environnement.....	35
V.12. 2021EXTXX2356 : Simulation de spectres de photoélectrons de composés oxygénés formés lors de l'oxydation du cyclohexane à basse température.....	36
V.13. 2022EMPPX2729 : Recherche de solvants verts pour des applications en biotechnologie : Étude par modélisation moléculaire	37
V.14. 2023EMPPX3297 : Calcul des propriétés thermochimiques et thermophysiques pour un grand nombre de molécules conçues dans le contexte du projet ERC-REACHER	38
VI. Pôle scientifique Matière, Matériaux, Métallurgie, Mécanique (M4).....	39
VI.1. 2017M4XXX0312 : Modélisation mésoscopique de la solidification dendritique.....	40
VI.2. 2017M4XXX0313 : Modélisation multi-échelles des procédés de coulée.....	41
VI.3. 2018M4XXX0251 : Turbulence de basse fréquence dans les plasmas de fusion.....	42
VI.4. 2018M4XXX0439 : Simulation numérique des procédés d'élaboration métallurgiques	43
VI.5. 2018M4XXX0593 : Modélisation ab-initio des défauts dans les métaux et alliages Métalliques.....	44
VI.6. 2019M4XXX0978 : Mechanisms of energy conversion in collisionless plasmas.....	45
VI.7. 2020M4XXX1952 : Propagation stochastique d'une paroi de domaine magnétique.....	46
VI.8. 2018M4XXX0708 : Modélisation de diagrammes de diffraction de rayons X réalisés in situ par des méthodes numériques type FFT (Fast Fourier Transform).....	47
VI.9. 2018M4XXX0868 : Etudes des relations structures-propriétés opto-électroniques de nouveaux matériaux organiques pour des applications en photovoltaïque.....	48
VI.10. 2019M4XXX0954 : Simulations à l'aide d'un code FreeFem++ des systèmes film/substrat sphériques soumis à une contraction thermomécanique du cœur	49
VI.11. 2020M4XXX1595 : Étude atomistique des défauts dans les cristaux	50
VI.12. 2021M4XXX2438 : Numerical study of the role of « macrozones » in alpha-beta titanium alloys.....	51
VI.13. 2021M4XXX2481 : Caractérisation discrète à l'échelle atomique de la plasticité aux interfaces dans les alliages complexes légers et transfert vers des modèles de continuum.....	52
VII. Pôle scientifique Observatoire Terre et Environnement de Lorraine (OTELo).....	53
VII.1. 2019OTELO1277 : Écoulements en milieux poreux et écoulements glaciaire.....	54
VII.2. 2020OTELO2019 : Simulation de propagation d'ondes sismiques	55
VIII. Autres.....	56
VIII.1. 2019EXTXX1184 : Atomistically Guided Alloy Design and Simulation of Microstructure Evolution.....	57

Avant-propos

Ce document présente une synthèse des rapports d'activité soumis par les responsables de projets du Mésocentre eXplor pour la période 2024-2025. Il met en avant les avancées et les résultats significatifs obtenus durant cette période et les activités réalisées au sein des projets.

Il liste également les principales publications scientifiques issues de l'utilisation des ressources du Mésocentre eXplor dans les différents domaines de recherche.

Ainsi, ce document reflète l'effervescence et la qualité des travaux menés au sein de notre communauté académique et scientifique à 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 / AgroParisTech, INRAE, UMR Silva, Nancy

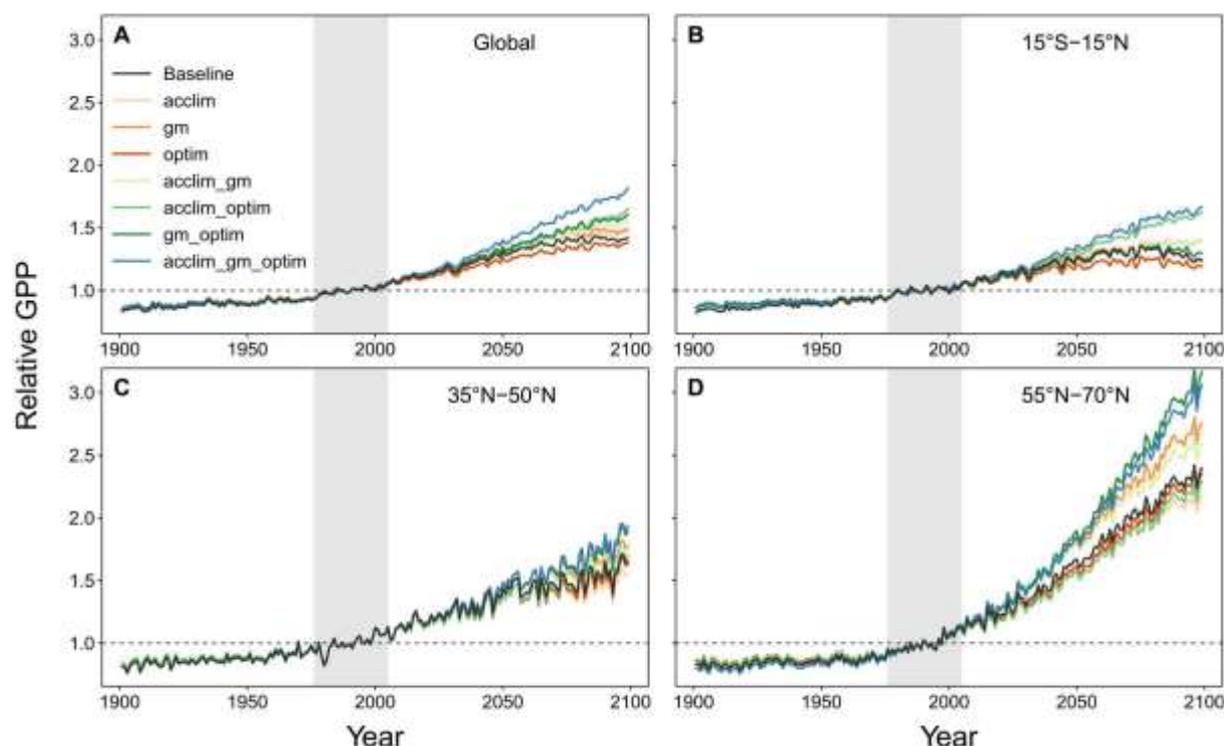


Figure: Time series of normalized GPP. Shown are factorial model runs performed in the study Knauer et al. (Sci Advances 2023) for the RCP8.5 climate scenario for (A) the globe, (B) the inner tropics (15 °S to 15 °N), (C) the temperate zone (35 °N to 50 °N), and (D) the boreal zone (55 °N to 70 °N). GPP was normalized to the mean of the 1976–2005 reference period (grey shaded area) for each model experiment and each latitude band.

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] Abramowitz, G., A. Ukkola, S. Hobeichi, J. Cranko Page, M. Lipson, M. G. De Kauwe, S. Green, C. Brenner, J. Frame, G. Nearing, M. Clark, M. Best, P. Anthoni, G. Arduini, S. Boussetta, S. Caldararu, K. Cho, M. Cuntz, *et al.* On the Predictability of Turbulent Fluxes from Land: PLUMBER2 MIP Experimental Description and Preliminary Results. *Biogeosciences* 21(23):5517–38. doi:10.5194/bg-21-5517-2024. **hal-04840629**
- [2] 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

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'abordant 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 dans le cadre de l'environnement de calcul eXplor, 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

Des calculs de pires cas pour CORE-MATH ont été réalisés sur eXplor, notamment en 2023 ceux des fonctions $\exp m1$, $\exp 10$ et asin en double précision, et en 2024 ceux de la fonction gamma 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. Ces calculs ont permis de valider l'installation du cluster juste après sa mise en service.

En juin 2025, le cluster a été utilisé pour trouver des pires cas des fonctions sinus, cosinus et tangente à l'aide d'un nouvel algorithme, qui sera soumis à la conférence ARITH en 2026 (travail en collaboration avec Tue Ly de chez Google).

Publications :

- [1] The CORE-MATH Project, Alexei Sibidanov, Paul Zimmermann, Stéphane Glondu, Proceedings of the 29th IEEE Symposium on Computer Arithmetic (ARITH 2022), 2022. <https://inria.hal.science/hal-03721525>
- [2] FastTwoSum Revisited, Claude-Pierre Jeannerod, Paul Zimmermann, Proceedings of 32nd IEEE International Symposium on Computer Arithmetic (ARITH 2025), El Paso (Texas, USA), 2025. <https://inria.hal.science/hal-04875749>
- [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.
- [4] Correct Rounding in Double Extended Precision, Sélène Corbineau and Paul Zimmermann, Proceedings of the 32nd IEEE International Symposium on Computer Arithmetic (ARITH 2025), El Paso (Texas, USA), 2025. <https://inria.hal.science/hal-04861251>

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

III.1. 2020BMSXX2165 : Etude de protéines par MD

Responsable : QUINTERNET Marc

Laboratoire IBSLor, Nancy

Etude de protéines par dynamique moléculaire. Les objectifs sont, une meilleure compréhension du mécanisme enzymatique de protéines, et des tests de stabilité de repliement après mutation *in silico*

Trajectoires calculées sur l'hydrolase NylB, enzyme capable de digérer le polymère de nylon. Le but est de localiser les sites d'entrée et de sortie du substrat, ainsi que les résidus acides aminés qui assiste l'ensemble du processus enzymatiques.

Pour le moment, les analyses sont en cours et demandent des confirmations expérimentales avec un travail de paillasse.

III.2. 2018BMSXX0632 : Étude des protéines du système Sulfazécine

Responsable : CHAGOT Benjamin

Laboratoire IMoPA

Le projet porte sur l'étude de protéines responsables de la synthèse de la sulfazécine et en particulier le domaine d'adénylation A3 qui est susceptible d'accepter différents substrats ce qui pourrait permettre de modifier le produit de synthèse ; et les domaines PCP1 et PCP0 de SulI et SulM qui pourraient être impliqués dans l'interaction des deux sous-unités afin de permettre un passage efficace du produit de synthèse entre les deux protéines.

Publications :

Analyse des données en cours.

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

Responsable : PAURON Lynn

Laboratoire IMoPA, Nancy

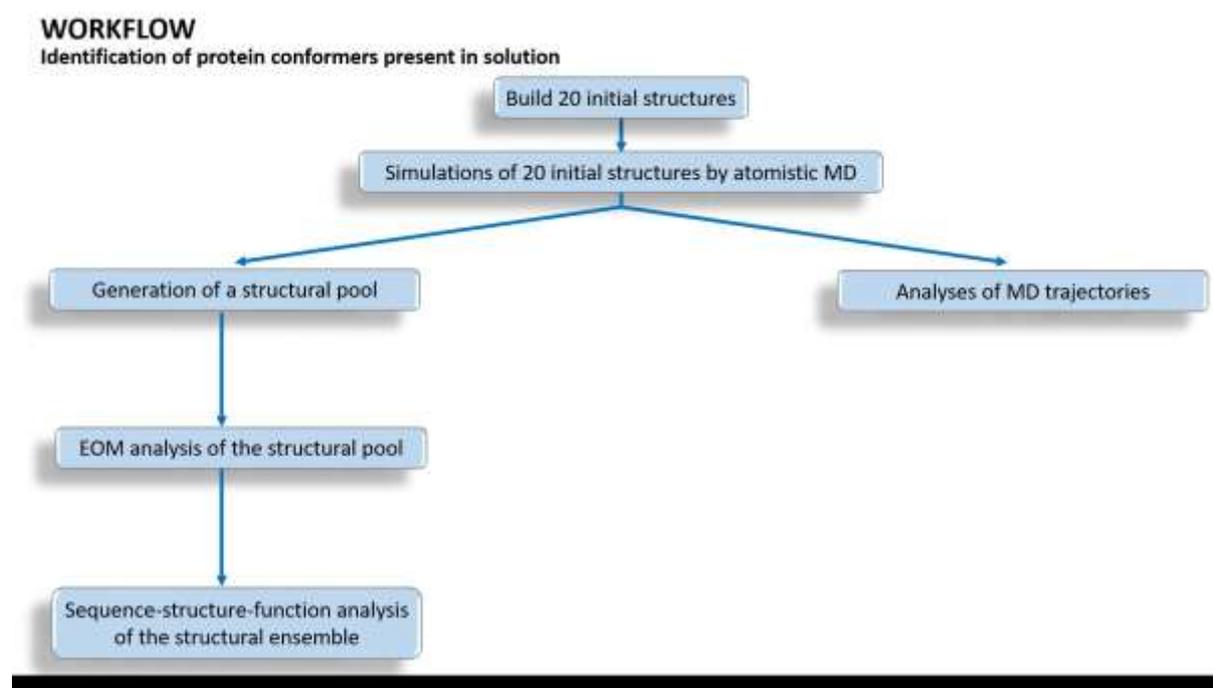


Figure: Flux de travail de la méthode d'optimisation ensemble

Ce projet porte sur l'étude par dynamique moléculaire (DM) des protéines de très grande taille appelées polykétides synthases, ou « PKS ». L'objectif de ce projet est d'établir des relations séquence-structure-fonction détaillées pour les séquences linker qui se situe entre les modules et domaines des PKS. Ces séquences linker sont responsables de la flexibilité interdomaine qui joue un rôle clé dans la biosynthèse des polycétides. Pour ce projet, nous étudions par DM des didomaines ACP, constitués de deux domaines ACP relié par une séquence linker flexible. Ces didomaines sont impliqués dans des mécanismes de beta-méthylation lors de la synthèse de certains polycétides d'intérêt industrielle. Mieux caractériser le processus de la bêta-méthylation dans divers systèmes PKS constitue une étape essentielle dans la maîtrise de celui-ci pour la conception et production de nouvelles molécules polycétides..

Publications :

Analyse des données en cours.

IV. Pôle scientifique Chimie et Physique Moléculaire (CPM)

IV.1. 2017CPMXX0085 : 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

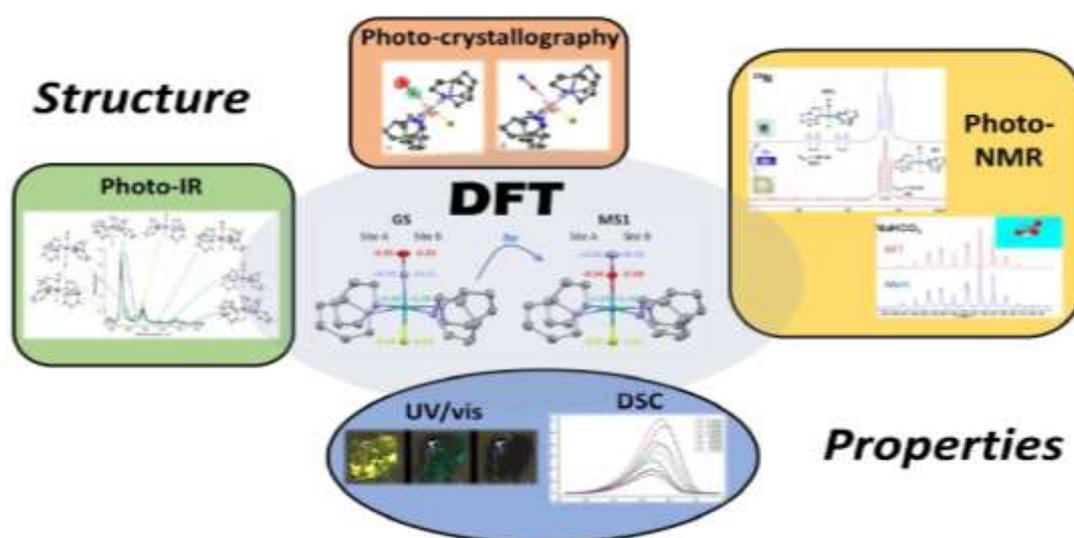


Figure: Linking molecular structure to optical properties with the aid of DFT calculations

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 calculs 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, fréquences vibrationnelles Infra Rouge) et de simuler les spectres correspondants.

Publications :

- [1] Pecourneau, J.; Losantos, R.; Gansmuller, A.; Parant, S.; Bernhard, Y.; Mourer, M.; Monari, A.; Pasc, A. Tuning the Competition between Photoisomerization and Photothermy in Biomimetic Cyclocurcumin Analogues. *J. Photochem. Photobiol. Chem.* 2023, 114583. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2023.114583>. **hal-03960769**
- [2] Mikhailov, A. A.; Gansmüller, A.; Konieczny, K. A.; Pillet, S.; Kostin, G.; Klüfers, P.; Woike, T.; Schaniel, D. Local Force Constants and Charges of the Nitrosyl Ligand in Photoinduced NO Linkage Isomers in a Prototypical Ruthenium Nitrosyl Complex. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2024, 26 (21), 15255–15267. <https://doi.org/10.1039/D4CP01374C>. **hal-04634458**

IV.2. 2021CPMXX2483 : Etude des interactions à trou sigma

Responsable : AUBERT Emmanuel

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

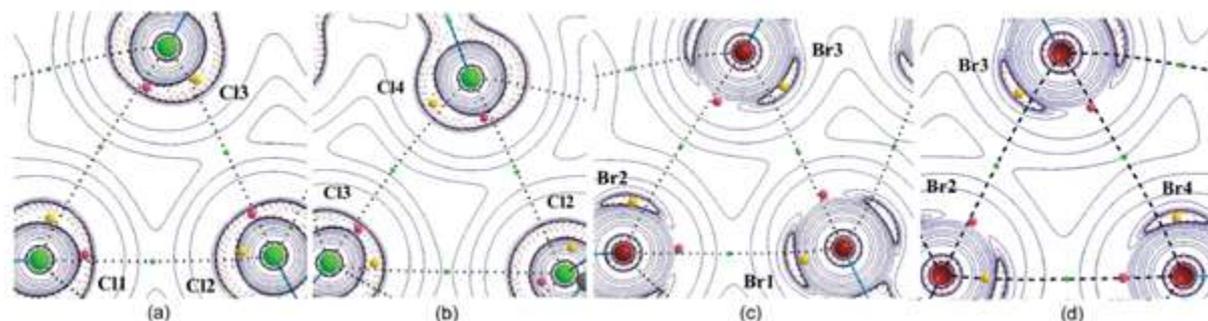


Figure: Laplacien de la densité électronique et ses points critiques dans les trimers de (a) Hexachlorobenzène, (b) pentachlorophénol, (c) hexabromobenzène, (d) pentabromophénol, montrant la complémentarité des zones électrophiles et nucléophiles. Gaussian 16, DFT B3LYP/Def2TZVPP

Les régions électrophiles des atomes d'halogène (Hal), de chalcogène (Chalc) et de pnictogène (Pnic), également appelées Sigma-Hole ou trou sigma, sont des sites préférentiels d'ancrage pour des partenaires moléculaires portant des groupes nucléophiles (Bases de Lewis). Dans le contexte de la Chimie Supramoléculaire, de l'Ingénierie Cristalline et de la Science des Matériaux, ces interactions fortes et directionnelles de type électrophile/nucléophile sont beaucoup moins explorées et utilisées que les liaisons hydrogène, alors que leur mise en œuvre est d'une importance primordiale dans ces domaines de recherche. En effet, en induisant l'organisation moléculaire dans l'espace, elles peuvent contrôler les propriétés des entités supramoléculaires et des matériaux au travers de relations structure-propriétés. Dans ce projet, nous nous concentrons sur l'analyse et la compréhension de la distribution de la densité électronique dans les régions intermoléculaires impliquant ces interactions de type trou sigma. Les objectifs du projet sur la conception des interactions Sigma-Hole sont triples. Dans un premier temps, on cherche à exacerber ces interactions par (i) l'introduction de groupes électroattracteurs renforçant le caractère électrophile des trous sigma, (ii) la co-cristallisation avec des bases de Lewis de basicité accrue, et (iii) la conception de systèmes coopératifs. De plus, alors que les sites électrophiles Sigma-Hole sont placés le long d'orientations moléculaires spécifiques dépendant des hybridations des atomes Hal, Chalc et Pnic, ils sont renforcés a priori avec les atomes les plus lourds de leurs séries respectives. Enfin, la modification des forces intermoléculaires construisant l'édifice cristallin permet de modifier les propriétés associées à cet édifice.

Publications :

- [1] Shukla, R., Aubert, E., Brezgunova, M., Lebègue, S., Fourmigué, M. & Espinosa, E. (2025). The origin of synthons and supramolecular motifs: beyond atoms and functional groups. *IUCrJ*, 12, 334-357. <https://doi.org/10.1107/S2052252525001447>. hal-05049396
- [2] Mangin, F., Fonquernie, O., Jewula, P., Brandès, S., Penouilh, M.-J., Bonnin, Q., Vincent, B., Espinosa, E., Aubert, E., Meyer, M., & Chambron, J.-C. (2024). Combining Desferriferrioxamine B and 1-Hydroxy-2-Piperidone ((PIPO)H) to Chelate Zirconium: Solution Structure of a Model Complex of the [89Zr]Zr-DFOcyclo*-mAb Radioimmunoconjugate. *ChemPlusChem*, 89, e202400062. <https://doi.org/10.1002/cplu.202400062>. hal-04570228

IV.3. 2019CPMXX0886 : Calculs séquentiels rapides en physique et chimie

Responsable : WAX Jean-François

Laboratoire LCP-A2MC, Metz

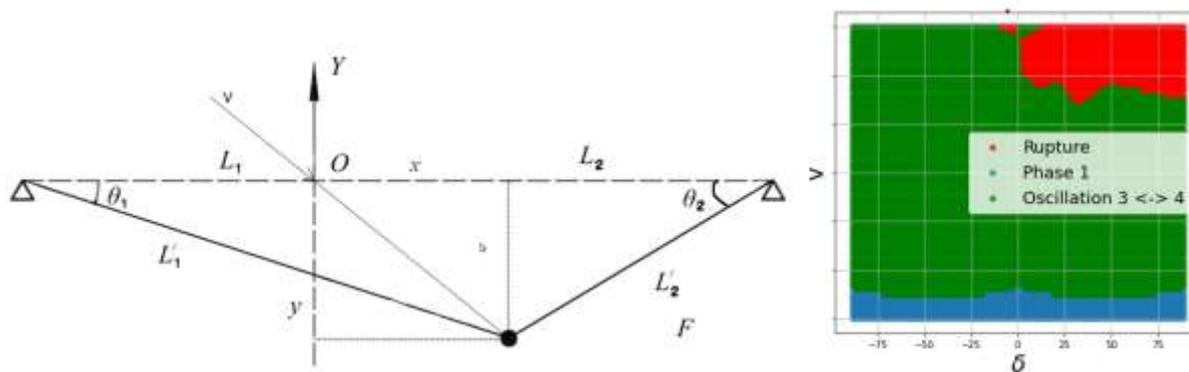


Figure: En fonction des paramètres de l'impact de la proie (vitesse, angle et position, figure de gauche), la réaction du fil de soie est cartographiée (figure de droite) selon qu'il y a déformation élastique (bleu), déformation plastique (vert) ou rupture (rouge).

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.

Le projet est principalement utilisé pour des travaux d'étudiants lors de leurs stages, avec l'intention de poursuivre ces recherches par la suite. Il a permis d'effectuer des calculs sur des questions de biomécanique, notamment la dynamique d'un fil de soie élastique lors de l'impact d'une proie, modélisée par deux équations différentielles non linéaires couplées résolues numériquement. Ce travail a été réalisé par M. Aymeric Stumm dans le cadre de son stage de master 1 en 2024, et un article intitulé « Dynamics of a single spider silk thread under impact » est en préparation, coécrit par A. Stumm, A. Blasi-Toccaceli et M. M. Müller.

En 2025, un autre étudiant de master 1, Louis Rapin, a terminé un projet d'optimisation visant à déterminer le chemin le plus court pour un piéton dans une ville de taille moyenne. Il a développé le code nécessaire, et des calculs supplémentaires sont prévus pour fournir les statistiques requises pour finaliser son travail.

Publications :

- [1] A. Stumm, A. Blasi-Toccaceli et M. M. Müller, Dynamics of a single spider silk thread under impact (2025, to be submitted)

IV.1. 2019CPMXX0918 : Dynamique de réseau des cristaux mixtes semi-conducteurs

Responsable : POSTNIKOV Andrei / Laboratoire LCP-A2MC, Metz

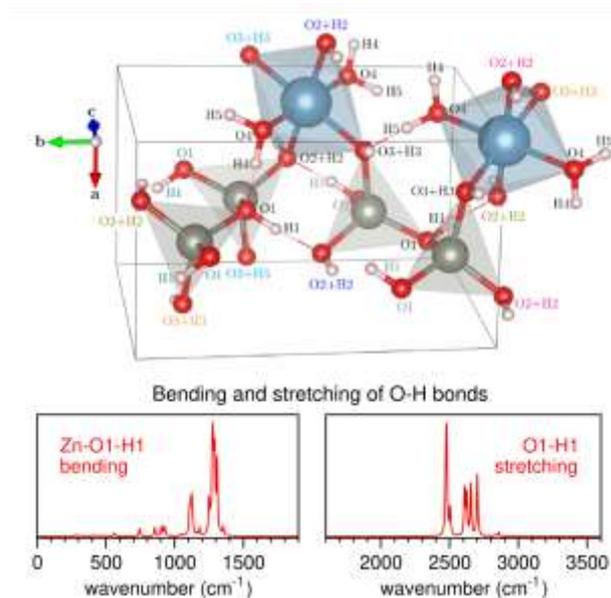


Figure: Structure cristalline du qatranaité, optimisée lors de calcul premiers principes (panneau supérieur) et densité des états de vibration correspondant à des étirements / flexions de liaisons chimiques choisies (panneaux inférieurs, unités arbitraires).

Le projet vise à élucider les propriétés élastiques et vibrationnelles des semi-conducteurs mixtes, dans lesquels la structure cristalline sous-jacente reste qualitativement bien définie, tandis que la distribution des espèces chimiques sur les sites du réseau varie en fonction de concentration et des tendances à l'agrégation. Les spectres de vibration de tels alliages semi-conducteurs, explorés par spectroscopie Raman et infrarouge, offrent un aperçu des propriétés élastiques et des tendances aux transitions de phase.

- Les calculs premiers principes des vibrations sont essentiels pour l'interprétation des spectres et l'identification des différents modes de vibration. De tels calculs pour des alliages mixtes, caractérisés par des compositions et concentrations différentes, exigent la construction de grandes supercellules, avec

(typiquement) quelques centaines d'atomes par cellule périodique. Les calculs sont principalement effectués à l'aide du code Siesta.

- Un développement intéressant de ces dernières années est la modélisation de la dispersion des phonons à travers la zone de Brillouin, qui peut être réalisée dans l'expérience par la diffusion inélastique des neutrons, gérable dans le cadre des projets d'accès aux lignes de diffusion des neutrons les réacteurs nucléaires. L'analyse théorique utilise la projection des vecteurs propres de vibrations collectives selon différents critères (vecteur d'onde, symétrie) et le calcul des fonctions spectrales pertinentes.

Publications :

- [1] A. Elmahjoubi, Mala N. Rao, A. Ivanov, A. V. Postnikov, A. Polian, T. Alhaddad, S.L. Chaplot, A. Piovano, S. Diliberto, S. Michel, A. Maillard, K. Strzałkowski, and O. Pagès : Lattice dynamics of hexagonal Zn_{1-x}Mg_xS. Soumis à Scientific Reports, <https://arxiv.org/pdf/2503.03381> .
- [2] A. Elmahjoubi, T. Alhaddad, A. V. Postnikov, and O. Pagès : Comment on "Infrared dielectric function of GaAs_{1-x}P_x semiconductor alloys near the reststrahlen bands" [Appl. Phys. Lett. 123, 172102 (2023)]. Appl. Phys. Lett. 125, 086101 (2024). hal-04733675
- [3] Andrei Postnikov, Anna Majtyka-Piłat, Dariusz Chrobak, and Józef Deniszczuk : Calculated vibration spectrum of calcium hexahydroxodizincate dihydrate (qatranaité). Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy 318, 124414 (2024).
- [4] Fatima Safieddine, Fouad El Haj Hassan, and Michel Kazan : Thermal properties of In₂O₃ and α -Ga₂S₃ compounds. Solid State Communications 391, 115629 (2024); <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2024.115629>

IV.2. 2018CPMXX0851 : Modélisation de la structure et des propriétés vibrationnelles d'hydroxydes doubles lamellaires

Responsable : ANDRE Erwan

Laboratoire LCPME UMR7564 CNRS-UL, Villers-lès-Nancy.

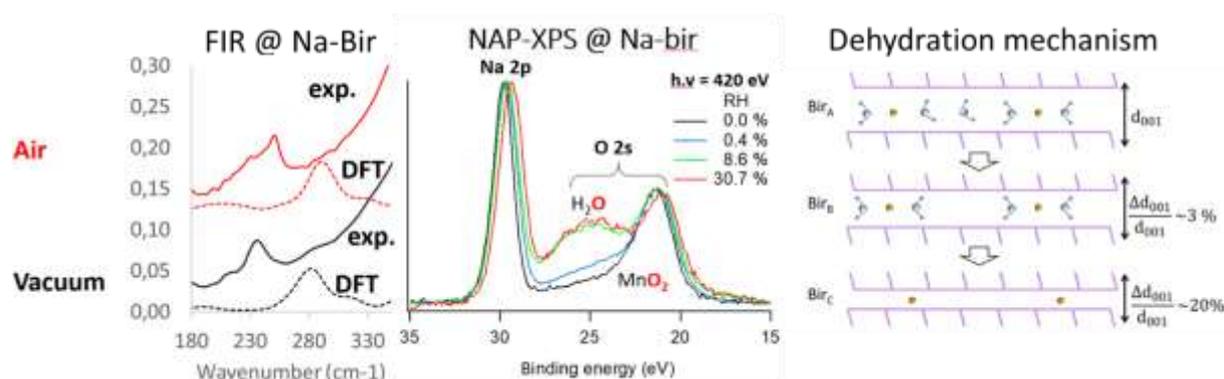


Figure: Comparaison entre état hydraté et déshydraté d'une Birnessite au sodium, par infrarouge (gauche), et par NAP-XPS (centre). Mécanisme de déshydratation proposé (droite).

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] E. André, D. Cornu, L. Pérez Ramírez, P. Durand, J.-J. Gallet, F. Bournel, F. Rochet, C. Ruby, C. Carteret, R. Coustel, The Dehydration Mechanism of Na and K Birnessites: A Comprehensive Multitechnique Study., x, Dalton Transactions 2024, 53 (23), 9952–9963. <https://doi.org/10.1039/D4DT00588K>. hal-04794271
- [2] A. Fezraoui, D. Cornu, G. Steciuk, J. Ghanbaja, M. Hébrant, Condensation of chromate into dichromate within MgAl Layered Double Hydroxide. An experimental and theoretical study., , soumis à Applied Clay Science le 28 mai 2025

IV.3. 2017CPMXX0277 : Interactions moléculaires et simulation de systèmes moléculaires en phase condensée

Responsable : MILLOT Claude

Laboratoire LPCT, Vandœuvre-lès-Nancy

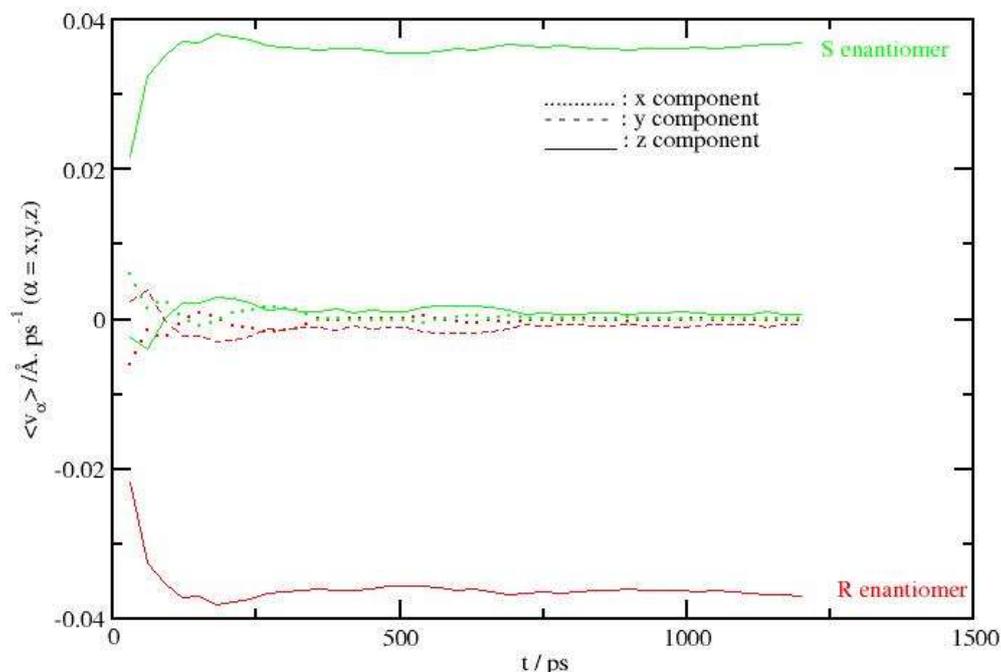


Figure: Moyenne statistique en fonction du temps de simulation des énantiomères R et S de 1-chloro,3-fluoroallène (298 K, 1 bar) soumis à un champ électrique d'amplitude $E_0 = 1,846 \cdot 10^9 \text{ V.m}^{-1}$ tournant dans le plan (x,y) à la vitesse de 1 rad.ps^{-1} . temps de simulation : 1,2 ns. 1000 molécules dans la boîte de simulation.

Des simulations de Dynamique Moléculaire ont été effectuées pour :

- modéliser les propriétés thermophysiques du modèle d'eau SPC/E de 250 à 400 K et à des pressions jusqu'à 1000 MPa et les confronter aux données expérimentales connues (l'étude concerne la densité, le coefficient d'expansion thermique isobare, la compressibilité isotherme, les capacités calorifiques à volume constant et à pression constante et la vitesse du son).
- modéliser la séparation des énantiomères d'un mélange racémique de 1-chloro,3-fluoroallène et de 1,3-dichloroallène sous l'effet d'un champ électrique tournant.

Des calculs de chimie quantique ont été effectués pour :

- étudier l'agrégation de la chlorophylle (a) en solution dans différents solvants (acétone, acétonitrile, tétrahydrofurane, pyridine) modélisés soit par quelques molécules explicites, soit par un modèle de continuum SMD ou IEFPCM et des molécules d'eau d'hydratation.

Publications :

- [1] Thermophysical properties of the SPC/E model of water between 250 and 400 K at pressures up to 1000 MPa. B. Jasiok, A.A. Pribylov, E.B. Postnikov, P. Friant-Michel, C. Millot, Fluid Phase Equilibria, 584, 114118 (2024). DOI : 10.1016/j.fluid.2024.114118. hal : hal-0513166v1.

IV.4. 2018CPMXX0602 : Effects of Self Aggregation on Perylenes Optical Properties

Responsable : PASTORE Mariachiara

Laboratoire LPCT, Vandœuvre-lès-Nancy

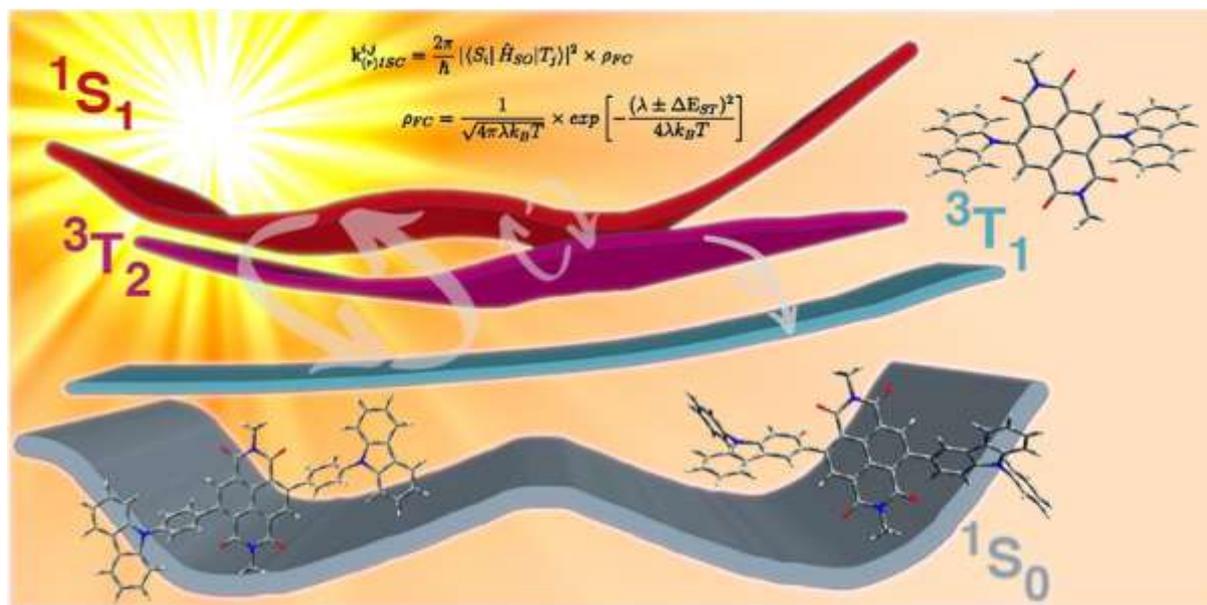


Figure: Key Role of Electronic and Structural Properties in Regulating Intersystem Crossing: An In-Depth Investigation on Naphthalene-Diimide Triads for Thermally Activated Delayed Fluorescence Applications.

Nous avons modélisé l'impact des ions et de la structure moléculaire sur les propriétés des matériaux utilisés dans des dispositifs photovoltaïques. Les résultats comment la présence d'ions comme le lithium influence la stabilité et les échanges à l'interface entre matériaux. Nous avons aussi proposé une nouvelle approche pour améliorer l'efficacité des colorants dans la conversion de la lumière en chaleur, tout en augmentant leur stabilité pour des application de thérapie photothermique. Enfin, une étude théorique approfondie des triades naphthalène-diimide substituées par carbazole révèle que la configuration donneur-accepteur influence la dynamique conformationnelle, les couplages spin-orbite et les taux de passage intersystème, éléments clés pour les applications en fluorescence retardée activée thermiquement (TADF).

Publications :

- [1] Alekos Segalina, Rita Boaretto, Stefano Caramori, Simone Piccinin, and Mariachiara Pastore ACS Applied Materials & Interfaces 2025 17 (4), 6282-6293 DOI:10.1021/acsami.4c18155. hal-05138707
- [2] Isabelle Toubia, Yann Bernhard, Valentin Diez Cabanes, Stéphanie Abdallah, Rana Mhanna, Tioga Gulon, Stéphane Parant, Jean-Pierre Malval, Jean-Bernard Regnouf-de-Vains, Antonio Monari, Mariachiara Pastore, and Andreea Pasc. The Journal of Physical Chemistry B 2024 128 (41), 10086-10102 DOI: 10.1021/acs.jpcc.4c04820. hal-04797410
- [3] Federico Coppola, Mushraf Hussain, Jianzhang Zhao, Ahmed M. El-Zohry, and Mariachiara Pastore The Journal of Physical Chemistry C 2024 128 (29), 11998-12009 DOI:10.1021/acs.jpcc.4c02033. hal-04797492

IV.5. 2019CPMXX0983 : Moving Under the Light

Responsable : BIGNON Emmanuelle

Laboratoire LPCT, Vandœuvre-lès-Nancy

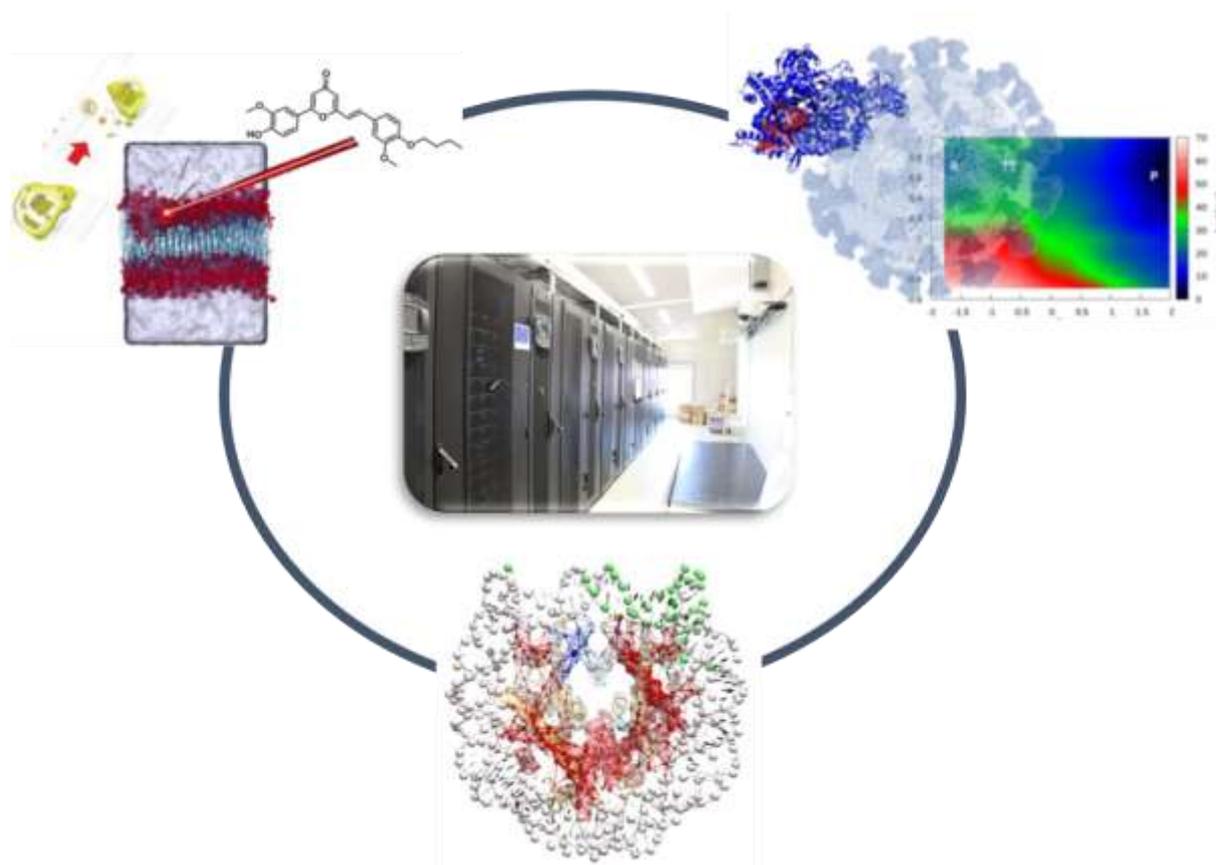


Figure: Le projet 'Moving Under the Light' vise à décrire, à l'aide d'outils informatiques, les mécanismes liés à des phénomènes biochimiques complexes: la compaction de l'ADN, l'expression génétique, et la reproduction virale.

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] Alehyane A., Fortino M.-G., Barbault F., Monari A*, Pietropaolo A. “Decoding Circular Dichroism Contributions in Chiral Hybrid Perovskites” (2025) Eur. J. Inorg. Chem. doi: 10.1002/ejic.202400636

-
- [2] Koca-Findik B., Catak S., Monari A.* “In silico study of active delivery of a photodynamic therapy drug targeting the folate receptor” (2025) *Photochem. Photobiol. Sc.* Doi: 10.1007/s43630-025-00745-4
- [3] Koca-Findik B., Uyar E.S., Monari A.*, Catak S. “Rational Molecular Design of Two-Photon Activated Temoporfin: A Computational Study for Advanced Photodynamic Therapy” (2025) *Phys. Chem. Chem. Phys.* Doi: 10.1039/D5CP01775K
- [4] Popovici I, Lognon E., Casaretto N., Monari A.*, Auffrant A. “Electronic Effects in Phosphino-Iminophosphorane PdII Complexes upon Varying the N Substituent” (2024) *Chem. Eur. J.* 30 e202303350. Doi: 10.1002/chem.202303350. hal-04772171
- [5] Delova A., Pasc A., Monari A.* “Interaction of the Immune System TIM-3 Protein with a Model Cellular Membrane Containing Phosphatidyl-Serine Lipids” (2024) *Chem. Eur. J.* Doi: 10.1002/chem.202304318. hal-04472210
- [6] Zanzi J., Pastorel Z., Duhayon C., Lognon E., Coudret C., Monari A., Dixon I. M. , Canac Y., Smietana M., Baslé O. “Counterion Effects in [Ru(bpy)3](X)2-Photocatalyzed Energy Transfer Reactions” (2024) *JACS AU* 4, 3049. Doi: 10.1021/jacsau.4c00384. hal-04687774
- [7] Froux A., D'Anna L., Rainot A., Neybecker C., Spinello A., Bonsignore R., Rouget R., Harlé G., Terenzi A., Monari A.*, Grandemange S., Barone G. “Metal Center and Aromatic Moiety in Schiff Base Complexes: Impact on G-Quadruplex Stabilization and Oncogene Downregulation” (2024) *Inorg. Chem. Front.*, 11, 5725. Doi: 10.1039/D4QI01394H. hal-04761170
- [8] Toubia I. , Bernhard Y. Diez Cabanes V., Abdallah S., Mhanna R., Gulon T., Parant S., Malval J.-P., Regnoufde-Vains J.-B., Monari A., Pastore M., Pasc A. “Enhancing Photothermal Energy Transduction through Interand Intramolecular Interactions of Multiple Two-Photon Dyes Appended onto Calix[4]arene” (2024) *J. Phys. Chem. B.* 128, 10086. Doi: 10.1021/acs.jpcc.4c04820. hal-04797410
- [9] D'Anna L., Froux A., Rainot A., Spinello A., Perricone U., Barbault F., Grandemange S., Barone G., Terenzi A., Monari A.* “Resolving the Structure of a Guanine Quadruplex in TMPRSS2 Messenger RNA by Circular Dichroism and Molecular Modeling” (2024) *Chem. Eur. J.* Doi: 10.1002/chem.202403572. hal-04761166
- [10] Fayafrou O., Lognon E., Duhayon C., Sortais J.-B., Monari A.*, O. Baslé, Canac Y. “Photoluminescent ruthenium(II) bipyridyl complexes containing phosphonium ylide ligands” (2024) *Chem. Comm.* Doi: 10.1039/D4CC05050A. hal-04765484

IV.6. 2020CPMXX2162 : Calcul de la compressibilité dans le CO₂ supercritique

Responsable : CAROF Antoine / Laboratoire LPCT, Vandœuvre-lès-Nancy

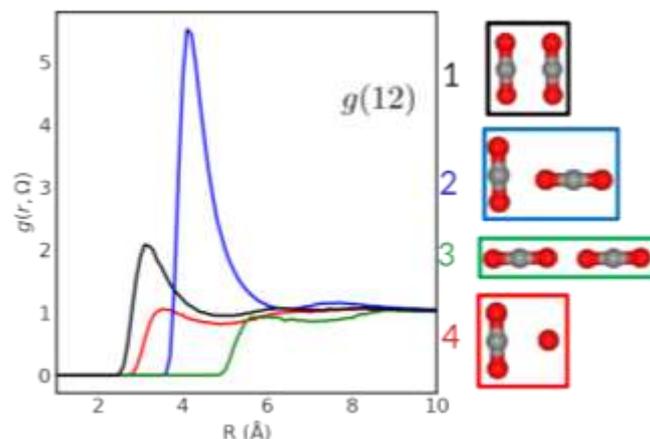


Figure: Structure du CO₂ proche du point critique. Fonction de distribution de paires pour 4 orientations : parallèle (noir), en T (bleu), aligné (vert) et croisé (rouge).

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] M.-H. Mohamed, L. Belloni, D. Borgis, F. Ingrosso, A. Carof, Molecular integral equations theory in the near critical region of CO₂, *Journal of Molecular Liquids*, 2025, 418, pp.126623. hal-04850087
- [2] A. Semmeq, K. Anand, A. Carof, A. Bastida, F. Ingrosso, On the Local Structure of Water Surrounding Inorganic Anions Within Layered Double Hydroxides Molecules, 2025, 30 (8), pp.1678. hal-05041376
- [3] G. Prampolini, V. Porwal, A. Carof, F. Ingrosso, 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, *Journal of Molecular Liquids*, 2024, 396, pp.123898. hal-04384063
- [4] V. Porwal, E. André, A. Carof, A. Bastida Pascual, C. Carteret et al. Structural and Vibrational Properties of Carboxylates Intercalated into Layered Double Hydroxides: A Joint Computational and Experimental Study, *Molecules*, 2024, 29 (8), pp.1853. hal-04552162
- [5] V. Porwal, A. Carof, F. Ingrosso, Hydration effects on the vibrational properties of carboxylates: From continuum models to QM/MM simulations, *Journal of Computational Chemistry*, 2023, 44 (23), pp.1898-1911. hal-04153406

IV.7. 2022CPMXX2687 : Enumération de conformations de protéines à l'aide d'une approche Branch-and-Prune

Responsable : MALLIAVIN Thérèse

Laboratoire LPCT, Vandœuvre-lès-Nancy

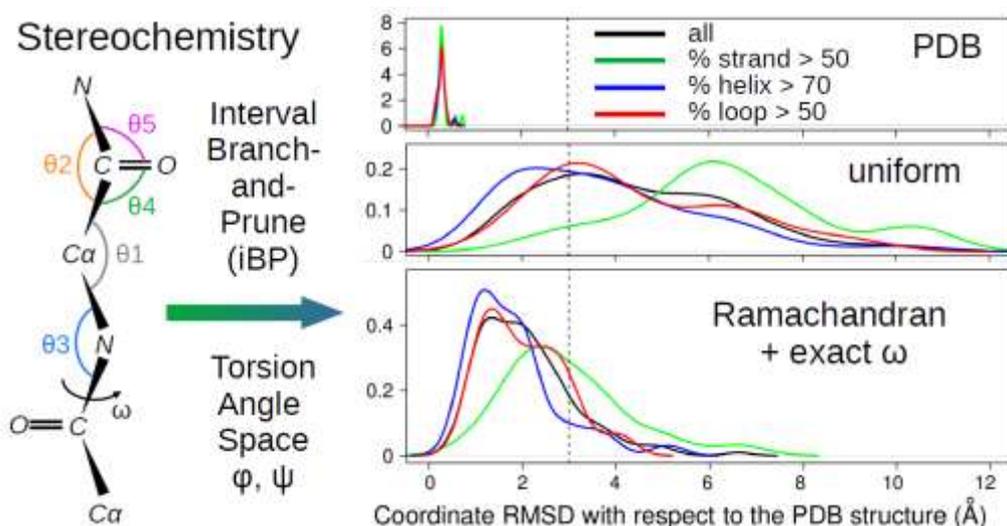


Figure: Protein structure prediction is generally based on the use of local conformational information coupled with long-range distance restraints. Such restraints can be derived from the knowledge of a template structure or the analysis of protein sequence alignment. Here, we derive protein conformations using only local conformations knowledge by means of the interval Branch-and-Prune algorithm. The computation efficiency is directly related to the knowledge of stereochemistry (bond angle and ω values) along the protein sequence and, in particular, to the variations of the torsion angle ω .

La détermination de la structure des protéines est un aspect crucial pour comprendre leur fonction. Cette détermination peut s'écrire sous la forme d'un problème d'optimisation d'un objet géométrique. La majorité des méthodes de calcul se base sur une optimisation globale utilisant des contraintes à longue portée. Dans ce projet, nous explorons une approche locale, permettant une énumération systématique des conformations. L'utilisation de cette approche permet une description de l'espace conformationnel de protéines désordonnées et ouvre la voie vers une extension de méthodes de prédiction comme AlphaFold à des cas où seules des informations structurales locales sont connues.

Publications :

- [1] Protein-membrane interactions with a twist. Klein J, Schad L, Malliavin TE, Müller MM. *Soft Matter*. 2025 Apr 8. doi: 10.1039/d4sm01494d. Online ahead of print. PMID: 40197985. hal-05097790
- [2] Influence of Stereochemistry in a Local Approach for Calculating Protein Conformations. da Rocha W, Liberti L, Mucherino A, Malliavin TE. *J Chem Inf Model*. 2024 Dec 9;64(23):8999-9008. doi: 10.1021/acs.jcim.4c01232. Epub 2024 Nov 19. PMID: 39560315. hal-04770588
- [3] Conformational Space of the Translocation Domain of Botulinum Toxin: Atomistic Modeling and Mesoscopic Description of the Coiled-Coil Helix Bundle. Delort A, Cottone G, Malliavin TE, Müller MM. *Int J Mol Sci*. 2024 Feb 20;25(5):2481. doi: 10.3390/ijms25052481. PMID: 38473729 Free PMC article. hal-04469786

IV.8. 2024CPMXX3385 : Factorisation exacte pour la dynamique a plusieurs dimensions

Responsable : TALOTTA Francesco

Laboratoire LPCT, Metz

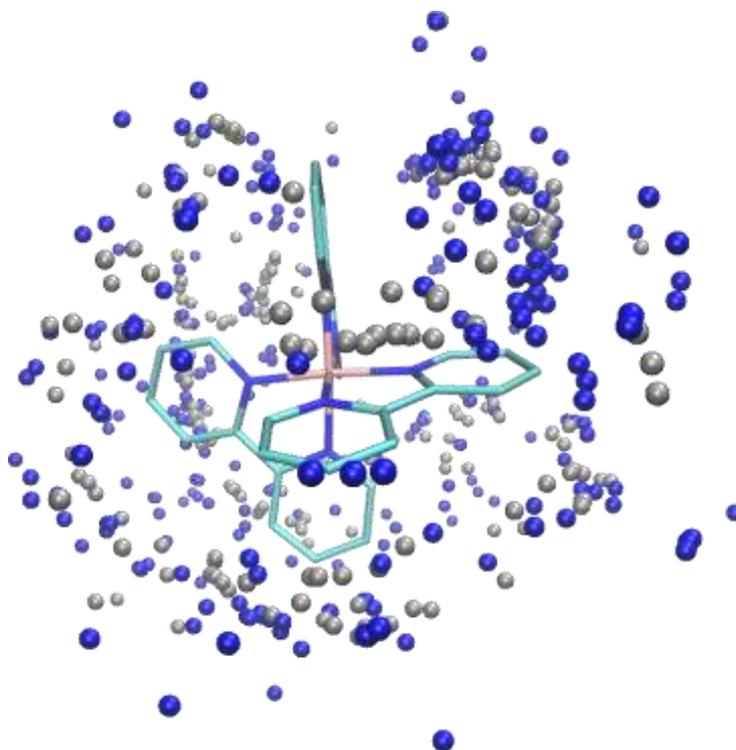


Figure: Conformers Spatial Distribution. Blue dots show the position of the substrate N-atom, whereas grey dots show the aryl center of mass.

Ce projet vise à développer des méthodes numériques avancées pour simuler la dynamique non adiabatique de systèmes moléculaires excités, en s'appuyant sur la théorie de la factorisation exacte. Cette approche permet une description plus rigoureuse du couplage électron-noyaux, dépassant les limitations des méthodes classiques telles que le surface-hopping. L'objectif principal est d'étendre l'algorithme G-CT-MQC à des systèmes de plus grande dimension, tout en optimisant son efficacité numérique. En parallèle, une étude des interactions non-covalentes est menée afin de caractériser les états pré-réactifs dans certaines réactions photochimiques. Cette analyse fournit des données numériques essentielles, venant enrichir le cadre global du projet. L'ensemble de ces travaux repose sur l'accès à des ressources de calcul intensif.

Publications :

- [1] M Gentile, F Talotta, JC Tremblay, L González, A Monari, Predominant Binding Mode of Palmatine to DNA, , The Journal of Physical Chemistry Letters 2024, 15 (42), 10570-10575. hal-05248545

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

V.1. 2017CPMXX0294 : Structure électronique des matériaux par calcul ab initio

Responsable : LEBEGUE Sébastien

Laboratoire LEMTA, Vandœuvre-lès-Nancy

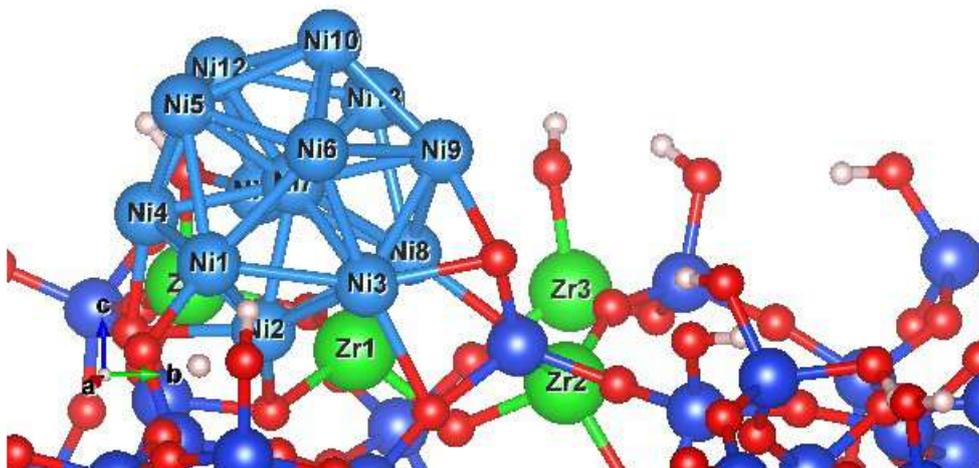


Figure: Heterogeneous catalysts : $Ni_{13}@/(ZrO_2)_4@SiO_2-3.3$

Heterogeneous catalysis plays a crucial role in numerous industrial applications, particularly in the upgrading of bio-oil via hydrodeoxygenation (HDO). Bio-oil is a complex mixture of oxygenated compounds such as phenol, guaiacol, anisole, catechol, and m-cresol, which require efficient catalytic processing to remove oxygen functionalities and enhance fuel quality. The presence of oxygen in biooil leads to undesirable properties, including high acidity, low stability, and poor energy density. To address these challenges, this study investigates the adsorption and catalytic mechanisms of oxygenated molecules, along with inhibitory molecules (CO_2 , CO , H_2O), on silica-supported transition metal clusters ($M_{13}@silica$, where $M = Fe, Co, Ni, Cu$) and silica-supported zirconia clusters ($(ZrO_2)_n$, $n = 1-4$).

Publications :

- [1] Zinc oxide-copper model nanocatalysts for carbon dioxide hydrogenation: morphology and interface effects, Sonia Hadaoui, Hang Liu, Zhang Lei, Sébastien Lebegue, Rabah Benbalag, Alexa Courty, and Ahmed Naitabdi, *Mater. Adv.*, 5, 1251-1263 (2024), 10.1039/D3MA00872J
- [2] Theoretical study of the catalytic hydrodeoxygenation of furan, methylfuran and benzofurane on MoS_2 , Wilfried G. Kanhounon, Saber Gueddida, Simplicie Koudjina, Guy Y. S. Atohoun, Jean-François Paul, Sébastien Lebègue, and Michael Badawi, *RSC Advances* 14, 22540-22547 (2024), 10.1039/D4RA03043E. hal-04732105

V.2. 2017EMPPX0195 : Computations of the thermoelectric materials

Responsible : CHAPUT Laurent

Laboratoire LEMTA, Vandœuvre-lès-Nancy

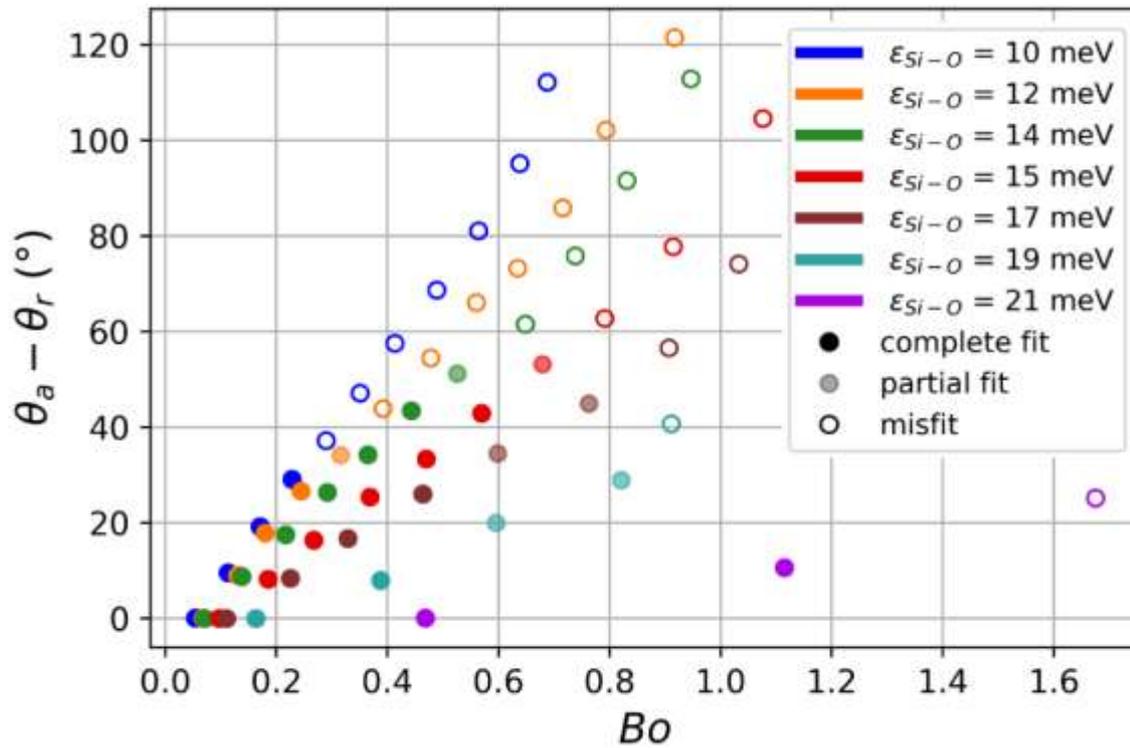


Figure : Contact angle hysteresis $\Delta\theta$ as a function of Bond number

The goal of the projet is to study transport properties in general. Heat and thermal transport are concerned, and electrical transport as well. They are studied using Monte Carlo, MD, and DFT calculations. This year we have focus on MD simulations.

Publications :

- [1] El-Rifai, A., Klochko, L., Perumanath, S., Lacroix, D., Pillai, R., & Isaiev, M. (2024). Spectral mechanisms of solid/liquid interfacial heat transfer in the presence of a meniscus (arXiv:2408.12485). <https://doi.org/10.48550/arXiv.2408.12485>
- [2] Nkenfack, I. M., Isaiev, M., Pernot, G., & Lacroix, D. (2024). Investigation of the thermal conductivity of shape-modulated silicon nanowires by the Monte Carlo method combined with Green-Kubo formalism. *Applied Physics Letters*, 124(25). <https://doi.org/10.1063/5.0193542>. hal-04790927
- [3] Mandrolko, V., Castanet, G., Burian, S., Grosu, Y., Klochko, L., Lacroix, D., & Isaiev, M. (2024). Features of the contact angle hysteresis at the nanoscale: A molecular dynamics insight. *Physics of Fluids*, 36(5), 052012. <https://doi.org/10.1063/5.0206801>. hal-04790991
- [4] Isaiev, M., Kyrychenko, N., Kuryliuk, V., & Lacroix, D. (2024). Features of phonon scattering by a spherical pore: Molecular dynamics insight. *Applied Physics Letters*, 124(14). <https://doi.org/10.1063/5.0200817>. hal-04790976

V.3. 2017EMPPX0357 : Etude du mouvement des fumées issues d'un incendie dans un tunnel

Responsable : MEHADDI Rabah

Laboratoire LEMTA, Vandœuvre-lès-Nancy

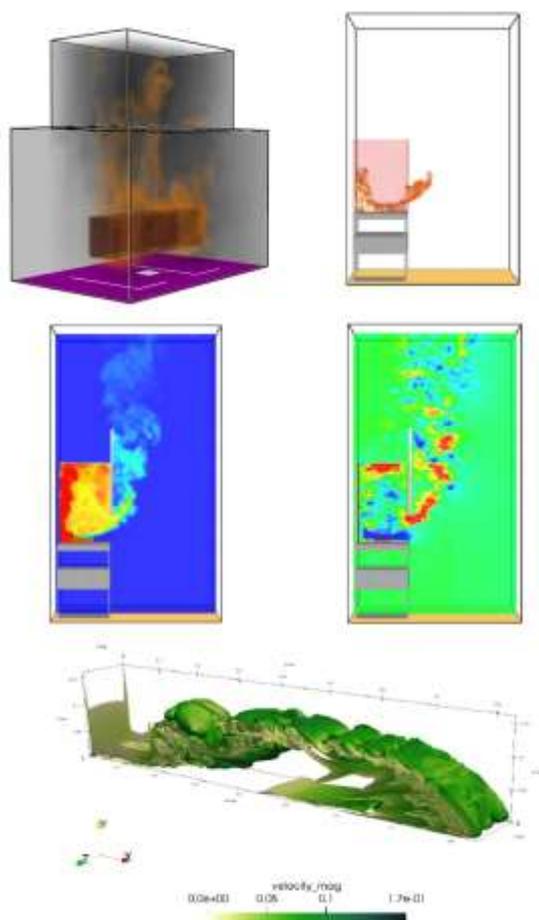


Figure: Combustion d'une buche de bois dans un poêle domestique, Feux dans un compartiment contenant une porte, courant de gravité.

Ce rapport résume les investigations numériques réalisées par l'OS FEUX du LEMTA sur le calculateur eXplor. Le projet avait été initié à la suite de la 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. Elles se focalisent principalement autour de la sécurité incendie et les écoulements incompressibles à masse volumique variable. Les logiciels utilisés sont FDS et Nek5000.

Publications :

- [1] Mehaddi, R., Lafdal, B., & Boulet, P. (2024, November). Numerical and experimental investigation of compartment fires. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 2885, No. 1, p. 012036). IOP Publishing. hal-04836275
- [2] Leclerc, C., Mehaddi, R., Acem, Z., Masselin, B., & Boulet, P. (2024, November). Study of a fire in a tunnel during construction phase. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 2885, No. 1, p. 012049). IOP Publishing. hal-04836290
- [3] Leclerc, C., Mehaddi, R., Acem, Z., Masselin, B., & Boulet, P. (2024, June). Etude expérimentale et numérique d'un incendie en tunnel en phase de construction. In *32ème Congrès Français de Thermique*. hal-04902466
- [4] Lafdal, B., Djebbar, R., Boulet, P., Mehaddi, R., Koutaiba, E., Beji, T., & Torero, J. L. (2022). Numerical study of the combustion regimes in naturally-vented compartment fires. *Fire Safety Journal*, 131, 103604. hal-03752739

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.C. da Fonseca, G.C. Fraga, F. Asllanaj, F.H.R. França. WBW model for solving the radiative heat transfer in participating gases bounded by non-gray walls. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2025, 252, pp.127400. 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2025.127400. hal-05149573
- [2] F. Asllanaj, S. Contassot-Vivier, F. Pascale, R. J. Collet da Fonseca, G. C. Fraga, F. H. R. Franca. Unified gas radiation model over the entire temperature range based on WSGG, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 241, p. 126713, 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2025.126713, 2025. hal-04912190
- [3] R. J. Collet da Fonseca, G. C. Fraga, F. Asllanaj, F. H. R. França. A new development for the WBW model at elevated pressure levels, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 323, p. 109021, DOI :10.1016/j.jqsrt.2024.109021, 2024. hal-04679791
- [4] F. Asllanaj, S. Contassot-Vivier, G. C. Fraga, F. H. R. França, 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, 2024. hal-04375649
- [5] F. Asllanaj, F. H. R. Franca, 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-04133402

V.5. 2018CPMXX0429 : Etude du facteur d'échelle du code crystal sur des mailles à 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] Federico DROGHETTI et al. "Catalytic CO₂ Reduction with Heptacoordinated Polypyridine Complexes: Switching the Selectivity via Metal Replacement". In : ChemSusChem 17.4 (2024), e202300737. DOI: <https://doi.org/10.1002/cssc.202300737>. hal-04297231
- [2] Fabien PASCALE et al. "t_{2g}d orbital ordering patterns in KBF₃ (B = Sc, Ti, Fe, Co) perovskites". Journal of Computational Chemistry 45.24 (sept. 2024), p. 2048-2058. DOI: 10.1002/jcc.27391. hal-04769611
- [3] F. PASCALE et al. "Jahn-Teller distortion, octahedra rotations and orbital ordering in perovskites: KScF₃ as a model system". Journal of Computational Chemistry 45.14 (mai 2024), p. 1067-1077. DOI: 10.1002/jcc.27306. hal-04445988
- [4] Fabien PASCALE et al. "On the role of the exact Hartree-Fock exchange in determining the Jahn-Teller energy splitting and electronic band gap in the KBF₃ (B=Sc, Ti, Fe, Co, Cr and Cu) perovskites. A quantum mechanical investigation". Chemical Physics Letters 836 (fév. 2024), p. 141053. DOI: 10.1016/j.cplett.2023.141053. hal-04445970
- [5] F. PASCALE et al. "Band gap, Jahn-Teller deformation, octahedra rotation in transition metal perovskites LaTiO₃". Journal of Computational Chemistry 45.10 (avr. 2024), p. 683-694. DOI: 10.1002/jcc.27274. hal-04445991
- [6] William C. MACKRODT et al. "The energies and charge and spin distributions in the low-lying levels of singlet and triplet N₂V defects in diamond from direct variational calculations of the excited states". The Journal of Chemical Physics 160.3 (jan. 2024), p. 034705. DOI: 10.1063/5.0178893. hal-04445977
- [7] Federico DROGHETTI et al. "Catalytic CO₂ Reduction with Heptacoordinated Polypyridine Complexes: Switching the Selectivity via Metal Replacement". ChemSusChem 17.4 (fév. 2024), e202300737. DOI: 10.1002/cssc.202300737. hal-04297231
- [8] Dania MELLAH et al. "Exploring the Structural Diversity in a Series of Caffeine:Gallic Acid 1:1 Cocrystals with Different Ratios of Solvent and Water: Insight into Intermolecular Interactions in Crystal Packings". Crystal Growth & Design 25.2 (jan. 2025), p. 376-391. DOI: 10.1021/acs.cgd.4c01402. hal-04862441

V.6. 2018EMPPX0691 : Un solver open source de type cut-cells

Responsable : CHENY Yoann

Laboratoire LEMTA, Vandœuvre-lès-Nancy

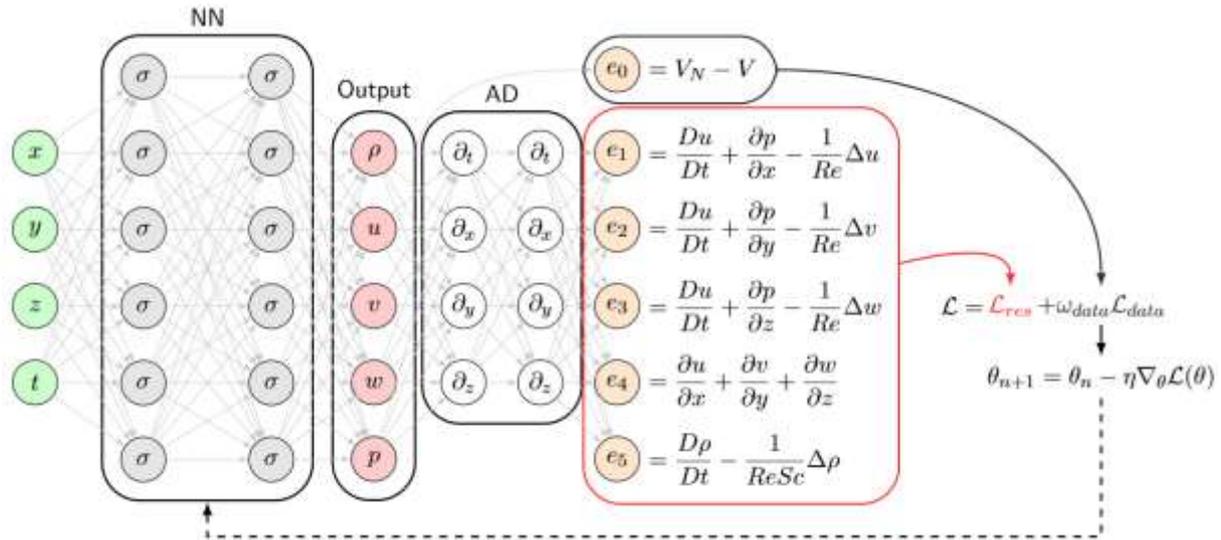


Figure: Réseau PINN pour la reconstruction de courants de gravité.

Physics-informed neural networks (PINNs) integrate governing equations directly into deep learning workflows, enabling accurate solutions for forward and inverse problems. This study employs PINNs, to reconstruct gravity currents in the lock-exchange flow configuration, using synthetic and experimental data sets. We first validate our approach using high-fidelity numerical data from the NEK5000 spectral solver, evaluating the reconstruction accuracy in various experimental setups. Next, we applied PINNs to experimental data that combine density measurements (via light attenuation techniques) and velocity data (via particle image velocimetry). Training uses density data, while velocity data is used for validation, achieving errors below 15% for velocity fields. Furthermore, our approach provides pressure field predictions, enabling the computation of the baroclinic energy flux field, critical for energy budget analyses in gravity currents.

Publications :

- [1] Delcey, M., Cheny, Y., & Kiesgen de Richter, S. (2023). Physics-informed neural networks for gravity currents reconstruction from limited data. *Physics of Fluids*, 35(2), 027124. hal-04016763
- [2] Delcey, M., Cheny, Y., Schneider, J., Becker, S., & De Richter, S. K. (2023). Enhancing Gravity Currents Analysis through Physics-Informed Neural Networks: Insights from Experimental Observations. arXiv preprint arXiv:2307.14794.

V.7. 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] Michel A., Arcen B. « The influence of drag, lift and torque modelling on the dynamics of ellipsoidal particles in a turbulent channel flow ». *International Journal of Multiphase Flow* 188, 105176 (2025). doi: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2025.105176. hal-05100692
- [2] Michel A., Arcen B. « Translational and angular velocities statistics of inertial prolate ellipsoids in a turbulent channel flow up to $Re\tau = 1000$ ». *Journal of Fluid Mechanics* 966, A17 (2023). doi: 10.1017/jfm.2023.420. hal-04355209

V.8. 2020EMPPX2087 : Modélisation multi-échelle des réservoirs de gaz de charbon

Responsable : LE Tien-Dung

Laboratoire LEMTA, Vandœuvre-lès-Nancy

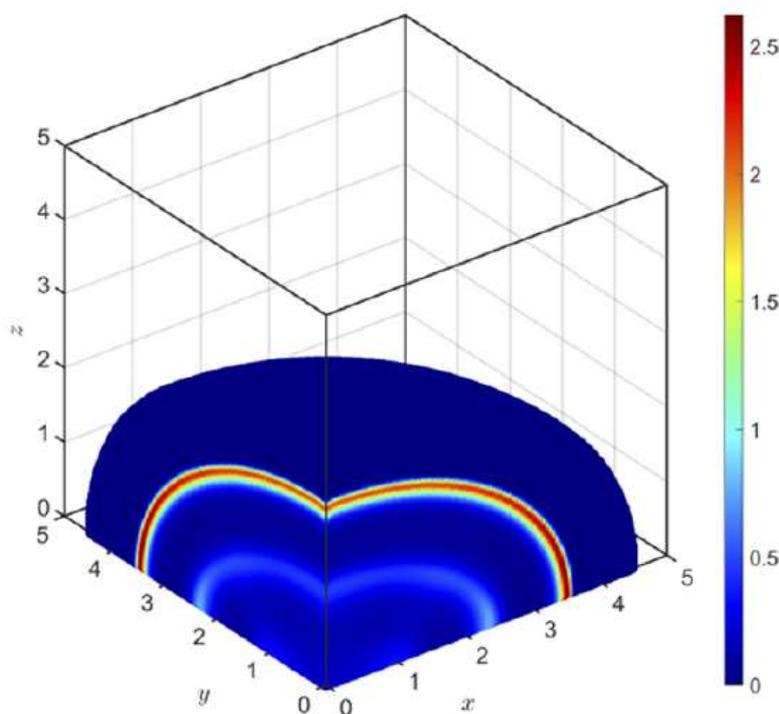


Figure. CO₂ density profile in an oblate spheroid.

Ce projet est destiné à développer des modèles couplés des phénomènes multi-physiques, multi-échelles en milieu poreux, notamment pour une application de stockage du CO₂ dans les réservoirs de gaz de charbon. 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 entraîneront une répercussion significative sur les propriétés de mécanique et de transport à l'échelle macroscopique.

Publications :

- [1] Q. D. Ha, T. D. Le, I. Pan_lov, C. Moyne, M. Murad, Upscaling poromechanical models of coalbed methane reservoir incorporating the inter-play between non-linear cleat deformation and solvation forces, *International Journal of Solids and Structures*, 262-263, 112083- (2023). hal-04009259
- [2] Q. D. Ha, T. D. Le, I. Panfilov, C. Moyne, Solvation force and adsorption isotherm of a fluid mixture in nanopores of complex geometry based on Fundamental Measure Theory, *Journal of Physics : Condensed Matter*, volume 33, 335002- (2021). hal-03476442

V.9. 2022EMPPX2737 : Qualité de l'air

Responsable : TANIÈRE Anne

Laboratoire LEMTA, Vandœuvre-lès-Nancy

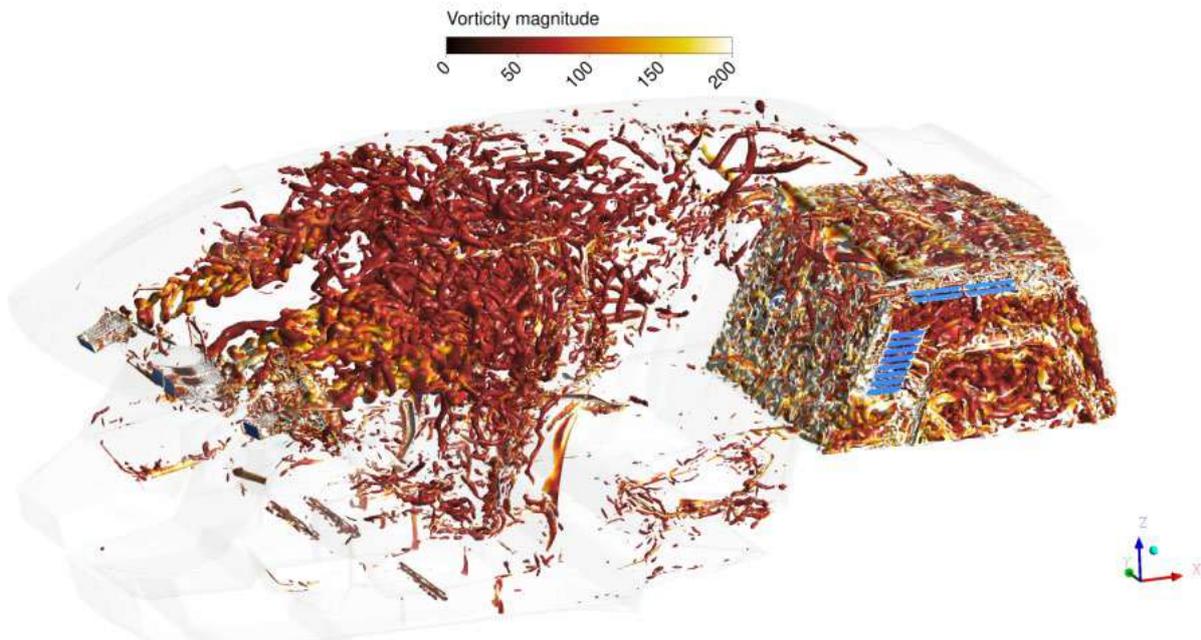


Figure. Visualisation des structures tourbillonnaires au travers du critère Q coloré par la vorticité ($Q \sim 480 \text{ s}^{-2}$).

Le projet de calcul sur le mésocentre eXplor vise à réaliser une simulation de dynamique des fluides (LES) de l'aérodynamique d'un habitacle automobile à échelle réelle. Les simulations sont en cours, avec des résultats finaux attendus d'ici la fin de l'année.

Parallèlement, une thèse a été lancée pour étudier numériquement et expérimentalement l'impact des polluants émis par les bateaux fluviaux sur la qualité de l'air à bord et dans les zones environnantes. Ce projet a pour objectif de modéliser et d'analyser les processus de dispersion des particules polluantes provenant des cheminées des bateaux. Il cherche à identifier les conditions favorisant des concentrations élevées de polluants et à explorer des stratégies d'atténuation.

Publications :

- [1] Mokhtar Djeddou, Anne Tanière, Georges Fokoua, Amine Mehel, Patrick Chevrier, A Large Eddy Simulation of airflow inside a full-scale car cabin, *Computers & Fluids*, Volume 300, 2025, 106755, <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2025.106755>.

V.10. 2023EMPPX3020 : Dessalement solaire autonome à faible maintenance destinée à des fins domestiques et agricoles

Responsable : KHALIJ Mohammed

Laboratoire LEMTA, Vandœuvre-lès-Nancy

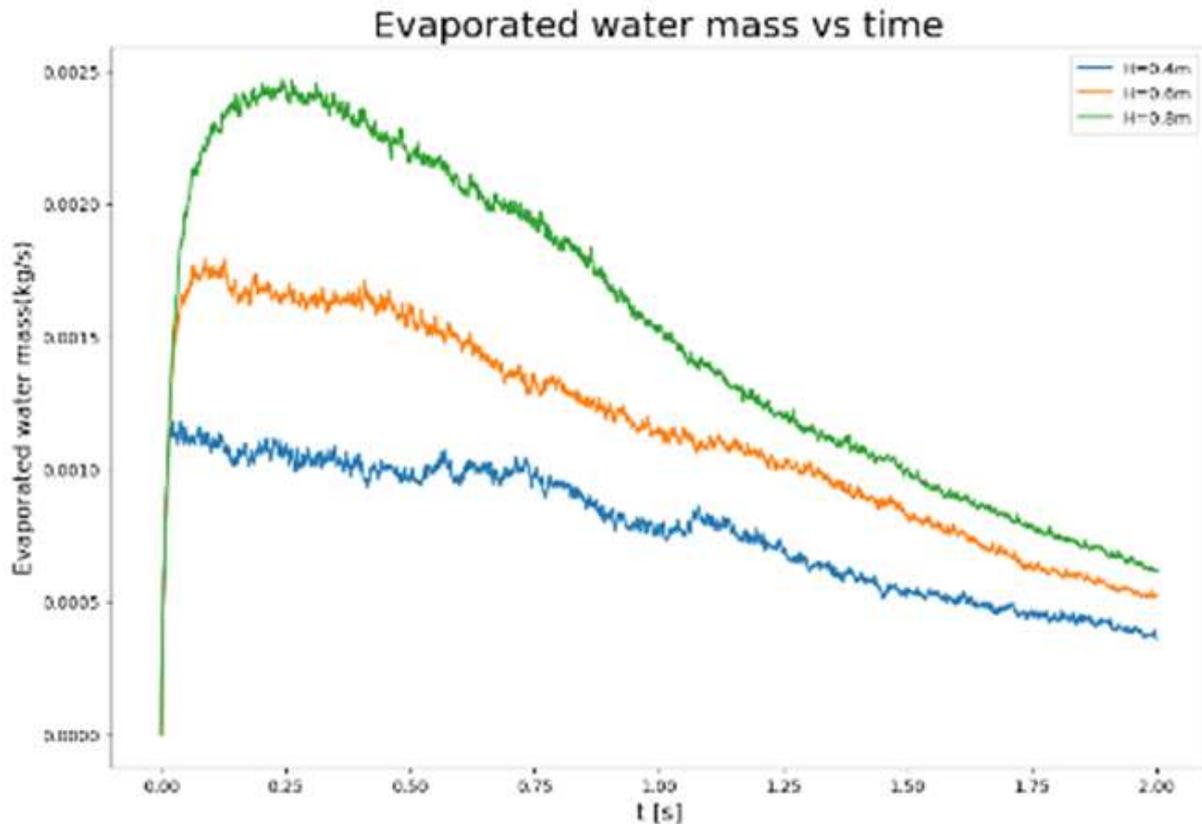


Figure. Effet de la hauteur de pulvérisateur sur l'humidité de l'air à la sortie du dessaleur

Une collaboration active avec la Tunisie et le Maroc vise à développer des systèmes de dessalement solaire adaptés aux conditions aride ou semi-aride du Maghreb. Le projet cible l'optimisation d'un humidificateur-déshumidificateur (HDH) solaire, pour maximiser la production d'eau douce et minimiser la consommation énergétique. Le HDH est couplé à des buses de nébulisations et d'un système de bullage pour accroître les échanges entre l'eau et l'air humide. Ces techniques visent à accroître la surface d'échange interfacial et l'efficacité du système. L'enjeu majeur est l'intensification des transferts air/eau. Une modélisation fine en CFD est mobilisée pour analyser ces phénomènes multiphasiques complexes.

Publications :

- [1] F. Atlane, M. Khalij, A. Kheiri, A. Gouni, A. Mourid, M. El Alami. Advancements and Challenges in Implementing Bubble Column Reactors in Desalination Systems: A Critical and Comprehensive Review. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 2025. hal-05226420

V.11. 2021EMPPX2491 : Modélisation cinétique détaillée des procédés pour l'énergie et l'environnement

Responsable : FOURNET René

Laboratoire LRGP, Nancy

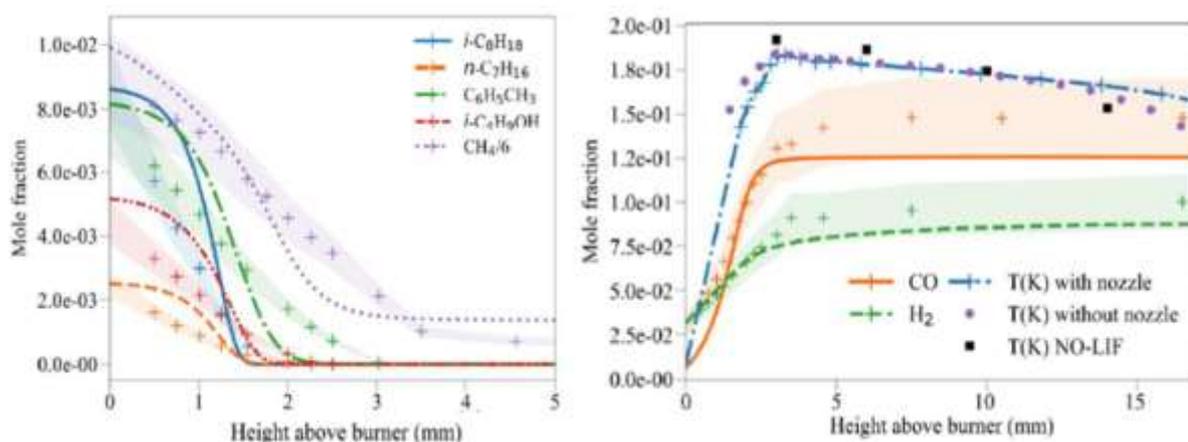


Figure. Fractions molaires d'une flamme méthane/ TRF-B (*n*-heptane, iso-octane, toluène, isobutanol) en fonction de la distance au brûleur. Symboles : points expérimentaux, lignes : simulations avec le modèle

Le 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, et désormais en phase liquide, pour des réactions d'oxydation, de pyrolyse et de combustion de molécules organiques. Au cours de la période 2023-2025, les principales études ont été menées dans le cadre d'un projet ERC-consolidator (BIOSCOPE) et d'une ANR "OFELIE".

Publications :

- [1] T. Fages, D. Kdouh, L. Gasnot, L. S. Tran, S. Gosselin, N. Lamoureux, R. Fournet, B. Sirjean, P. A. Glaude, A TRF iso Butanol kinetic mechanism for the prediction of pollutant with validation against novel rich atmospheric flame experiments, *Fuel* 387 (2025) 134405. hal-04903729
- [2] F. Paes, G. de Souza Batalha, F. Citrangolo Destro, R. Fournet, R. Privat, J. N. Jaubert, B. Sirjean, Integrating Solvent Effects into the Prediction of Kinetic Constants Using a COSMO Based Equation of State, *Journal of Chemical Theory and Computation* 21 (2025) 3625 3648. hal-05029261
- [3] T. Fages, R. Veillet, R. Fournet, B. Sirjean, P. A. Glaude, A n automatic merging method for large kinetic mechanisms: Application to a surrogate fuel combustion model, *Chem. Eng. Sci.* 302 (2025). hal-04781408
- [4] F.C. Destro, R. Fournet, R. Bounaceur, V. Warth, P.A. Glaude, B. Sirjean, Automatization of theoretical kinetic data generation for tabulated TS models building Part II: 1,2 to 1,5 H shift reactions in alkyl radicals, *Combust. Flame* 270 (2024) 113732. hal-04767708
- [5] F.C. Destro, R. Fournet, R. Bounaceur, V. Warth, P.A. Glaude, B. Sirjean, Automatization of theoretical kinetic data generation for tabulated TS models building Part I: Application to 1,3 H-shift reactions, *Combust. Flame* 270 (2024) 11373 1. hal-04767685
- [6] F.C. Destro, R. Fournet, B. Sirjean, S.J. Klippenstein, On the prediction of pressure effects for the combination kinetics of two alkyl radicals with the geometric mean rule, *Proc. Combust. Inst.* 40 (2024) 105380. hal-04767642

V.12. 2021EXTXX2356 : Simulation de spectres de photoélectrons de composés oxygénés formés lors de l'oxydation du cyclohexane à basse température

Responsable : BOURGALAIS Jérémy

Laboratoire LRGP, Nancy

Une connaissance approfondie des mécanismes d'oxydation des molécules organiques constituant les carburants actuels et futurs est essentielle pour développer des procédés de conversion d'énergie plus économiques et écologiques. Au LRGP, nous reproduisons en laboratoire la combustion de carburants dans des conditions proches de celles rencontrées en milieu industriel, notamment en couplant ces études à des analyses par spectrométrie de masse sur rayonnement synchrotron. Cette approche permet d'identifier les produits et intermédiaire d'oxydation, par validation des attributions grâce à des calculs théoriques réalisés avec eXplor.

Publications :

- [1] D. Li, D. Li, O. Herbinet, J. Huang, G. Garcia, et al.. Conformational effects in the identification and quantification of ketohydroperoxides in the oxidation of n-pentane. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2025, 27 (3), pp.1241-1249. hal-04870430
- [2] C. Smith Lewin, O. Herbinet, P. Arnoux, F. Battin-Leclerc, G A Garcia, et al.. Conformational fluxionality of long-chain alkene clusters in the gas phase evidenced from a combined experimental and theoretical approach. *The Journal of Chemical Physics*, 2025, 162 (7), pp.074302. hal-05012266
- [3] C. Smith Lewin, A. Kumar, O. Herbinet, P. Arnoux, R. Asgher, et al.. 1-Hexene Ozonolysis across Atmospheric and Combustion Temperatures via Synchrotron-Based Photoelectron Spectroscopy and Chemical Ionization Mass Spectrometry. *Journal of Physical Chemistry A*, 2024, 128 (27), pp.5374-5385. hal-04732661
- [4] C. Smith Lewin, O. Herbinet, F. Battin-Leclerc, L.-S. Tran, G. Vanhove, et al.. Enhancing 1-Hexene Reactivity Under Inhibitive Temperatures Using Ozone. *Energy & Fuels*, 2024, 38 (14), pp.13295-13303. hal-04732666
- [5] J. Bourgalais, X. Mercier, M. Al-Mogren, M. Hochlaf. Accurate Prediction of Adiabatic Ionization Energies for PAHs and Substituted Analogues. *Journal of Physical Chemistry A*, 2023, 127 (40), pp.8447-8458. hal-04234691
- [6] J. Bourgalais, C. Smith Lewin, O. Herbinet, G. Garcia, P. Arnoux, 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 (2), pp.113065. hal-04234675
- [7] J. Bourgalais, H. H. Carstensen, O. Herbinet, G. Garcia, P. Arnoux, 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. *Journal of Physical Chemistry A*, 2022, 126 (34), pp.5784-5799. hal-03827417

V.13. 2022EMPPX2729 : Recherche de solvants verts pour des applications en biotechnologie : Étude par modélisation moléculaire

Responsable : CHEBIL Latifa

Laboratoire LRGP, Nancy

Les solvants eutectiques profonds (DES) de type V, composés de molécules non ioniques, sont de plus en plus considérés comme des alternatives durables aux solvants organiques traditionnels. Ce travail se concentre sur l'interaction de la quercétine (QUE), un flavonoïde naturel aux propriétés antioxydantes, avec deux DES à base de menthol : MEN LAC (menthol acide lactique) et MEN ETG (menthol éthylène glycol). L'objectif est de comprendre les mécanismes de solubilisation à l'échelle moléculaire et de caractériser les microstructures formées, en utilisant des approches expérimentales et des simulations de dynamique moléculaire.

Les résultats expérimentaux montrent une amélioration significative de la solubilité de la quercétine dans les deux DES, particulièrement dans MEN ETG (1:3). Les analyses FTIR révèlent des interactions hydrogène entre les groupes hydroxyles de la quercétine et les DES. Les simulations de dynamique moléculaire avec GROMACS ont permis d'étudier la microstructure des mélanges, montrant une forte affinité entre les groupements OH de la quercétine et les groupes carboxyles ou hydroxyles des DES, surtout avec l'éthylène glycol dans MEN ETG.

L'analyse des liaisons hydrogène indique une durée de vie plus longue dans MEN LAC, suggérant une structuration plus rigide autour de la quercétine, tandis que MEN ETG, plus fluide, favorise sa mobilité et sa dispersion. Ces résultats offrent une meilleure compréhension des interactions entre la quercétine et les DES, ouvrant des perspectives pour améliorer la biodisponibilité de composés bioactifs peu solubles.

Publications :

Ces résultats, en cours de rédaction pour une publication scientifique, apportent un éclairage nouveau sur les mécanismes d'interaction de la quercétine dans les DES de type V, et ouvrent la voie à de nombreuses applications, notamment dans le domaine de l'extraction.

V.14. 2023EMPPX3297 : Calcul des propriétés thermochimiques et thermophysiques pour un grand nombre de molécules conçues dans le contexte du projet ERC-REACHER

Responsable : LASALA Silvia

Laboratoire LRGP, Nancy

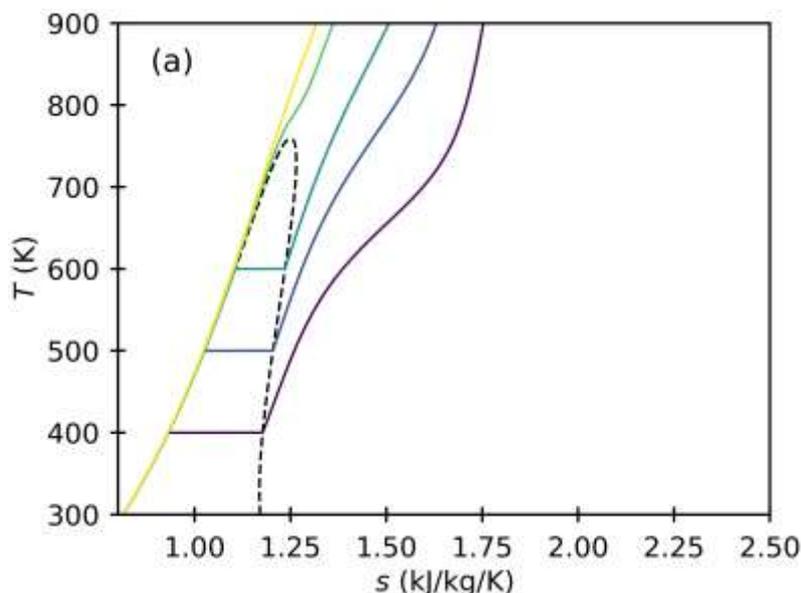


Figure. Diagramme température (T)- entropie (s) du fluide réactif $Al_2Br_6 \rightleftharpoons 2 AlBr_3$, caractérisé par chimie quantique et simulations Monte Carlo

Cette demande d'attribution de ressources informatiques permet la réalisation d'une partie importante du projet de recherche REACHER, en cours, financé par le European Research Council. Ce projet vise à évaluer le potentiel d'utilisation de fluides réactifs comme fluides de travail de cycles thermodynamiques, à la place de fluides inertes (tels que l'eau, le CO_2 , les hydrocarbures, ...). Ceci avec l'objectif d'améliorer les performances énergétiques des systèmes de production d'électricité (centrales électriques), des pompes à chaleur et des systèmes de réfrigération. Le projet est organisé en trois volets principaux visant : 1) la conception de fluides réactifs appropriés, la caractérisation des propriétés thermochimiques et thermophysiques des fluides conçus ; 2) l'optimisation de l'architecture des cycles thermodynamiques fonctionnant avec ces fluides ; 3) la validation expérimentale de la performance d'une centrale électrique fonctionnant avec ces fluides.

Publications :

Analyse des données en cours.

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

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

Responsable : ZALOZNIK Miha

Institut Jean Lamour, Nancy

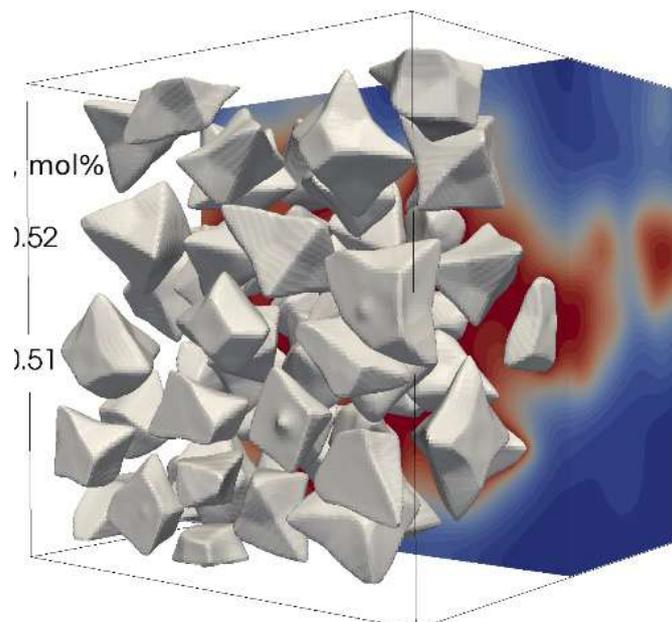


Figure. Simulation GEM de la croissance equiaxe lors de la solidification d'un alliage

Les modèles macroscopiques de solidification qui permettent la simulation des procédés industriels (coulée par exemple) doivent être enrichis par des modèles décrivant les phénomènes microscopiques. Cela passe par le développement de modèles mésoscopiques, comblant l'écart entre les échelles micro (1–100 μm) et macro (0.1–1 m), ainsi que par des approches de changement d'échelle reliant les différentes échelles. Le modèle d'enveloppe des grains (GEM) s'est imposé ces dernières années comme un outil efficace pour simuler des ensembles de grains avec un coût numérique raisonnable. Parallèlement, des méthodes hiérarchiques de changement d'échelle sont développées, dans le cadre plus large de l'approche multi-échelles ICME (Integrated Computational Materials Engineering).

Publications :

- [1] M. Jančič, M. Založnik, G. Kosec, Meshless interface tracking for the simulation of dendrite envelope growth, *Journal of Computational Physics* 507 (2024) 112973. doi:10.1016/j.jcp.2024.112973. hal-04532003

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

Responsable : ZALOZNIK Miha

Institut Jean Lamour, Nancy

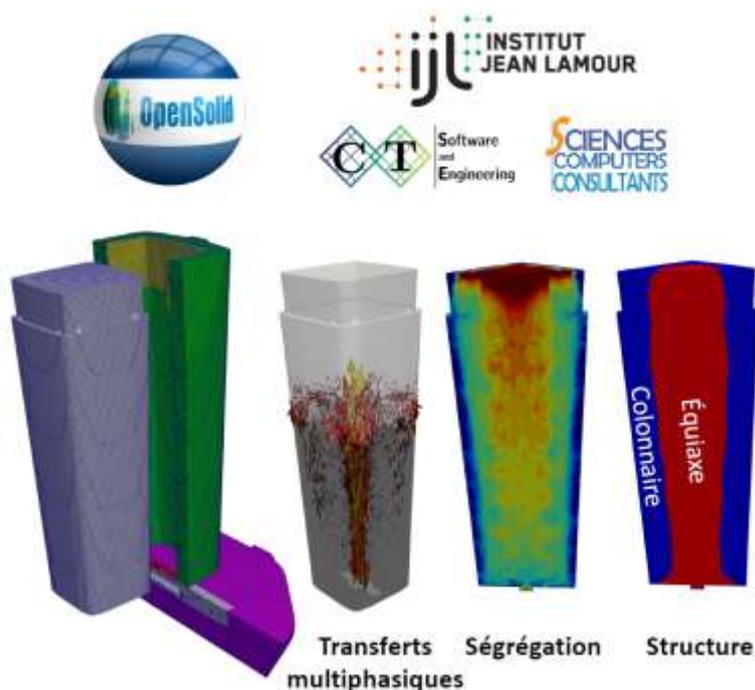


Figure. Modélisation multi-échelles et multi-physique des procédés de coulée

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, Institut Jean Lamour (2022).
- [2] L. Gutman, Understanding and optimising the formation of local chemical heterogeneities in large forging ingots used by the nuclear industry, These de doctorat, Université de Lorraine (Jul. 2024). tel-04847774

VI.3. 2018M4XXX0251 : Turbulence de basse fréquence dans les plasmas de fusion

Responsable : LESUR Maxime

Institut Jean Lamour, Nancy

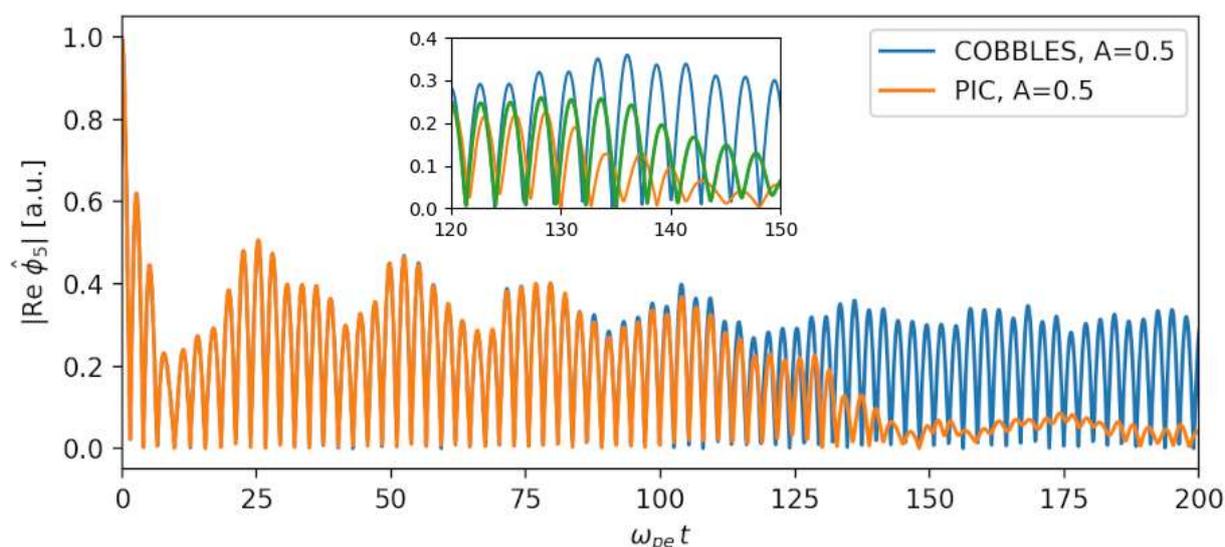


Figure. Benchmark between two different numerical methods : time-evolution of potential fluctuations in a 1D plasma, obtained from the semi-Lagrangian code COBBLES, and from a PIC code with 20 million macroparticles. Inset: zoom on the $120 < t < 150$ section, with additional curve (green, bold) corresponding to a PIC simulation with 10 times more macroparticles (200 million).

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 toroïdale) 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 à l'IJL vient de s'achever, 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] M. Lesur, J. Moritz, E. Gravier, T. Drouot, Benchmark between N-body, PIC, and semi-Lagrangian simulations of Landau-damped Langmuir wave, *Phys. Plasmas* 32, 013901 (2025). hal-04835129
- [2] A. Guillevic, M. Lesur, D. Mandal, X. Garbet, E. Gravier, G. Lo-Cascio, A. Ghizzo, T. Réveillé, Phase-space single electron-hole acceleration, *Phys. Plasmas* 32, 022117 (2025). hal-04964940
- [3] J. Bourgeois, M. Lesur, G. Cuerva-Lazaro, Y. Kosuga, Impurity Parallel Velocity Gradient Instability, *Open Plasma Science* 1, 1 (2024). hal-05024583

VI.4. 2018M4XXX0439 : Simulation numérique des procédés d'élaboration métallurgiques

Responsable : KROLL-RABOTIN Jean-Sébastien

Institut Jean Lamour, Nancy

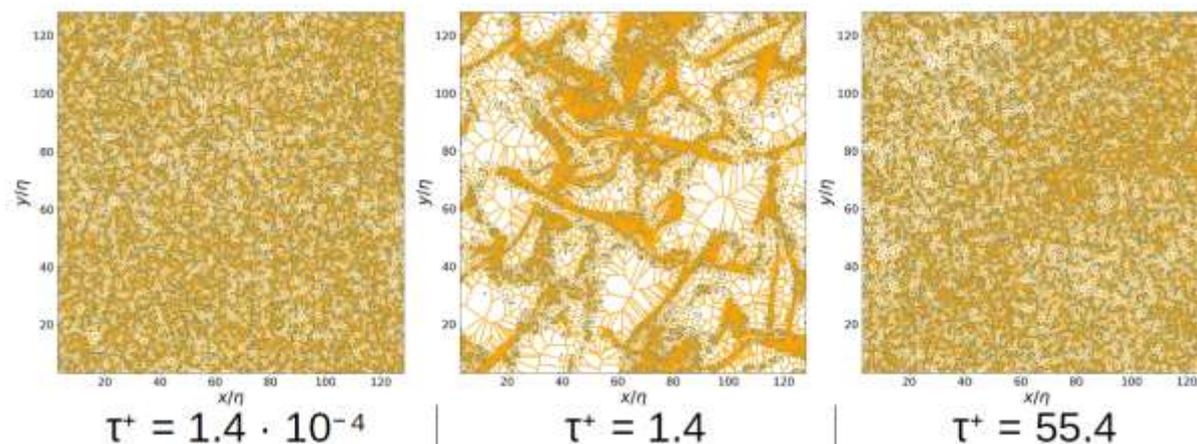


Figure. Effet du nombre de Stokes (τ^+) sur la concentration préférentielle dans un écoulement turbulent, analyse de la répartition spatiale des particules par pavage de Voronoï

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] Bellache, H., Chapelle, P., Kroll-Rabotin, J.-S., Étude numérique de la dispersion de particules dans une turbulence homogène et isotrope, 19e Congrès de la Société Française de Génie des Procédés (SFGP2024), présentation orale. hal-05191035

VI.5. 2018M4XXX0593 : Modélisation ab-initio des défauts dans les métaux et alliages Métalliques

Responsable : DEZERARD Lucile

Institut Jean Lamour, Nancy

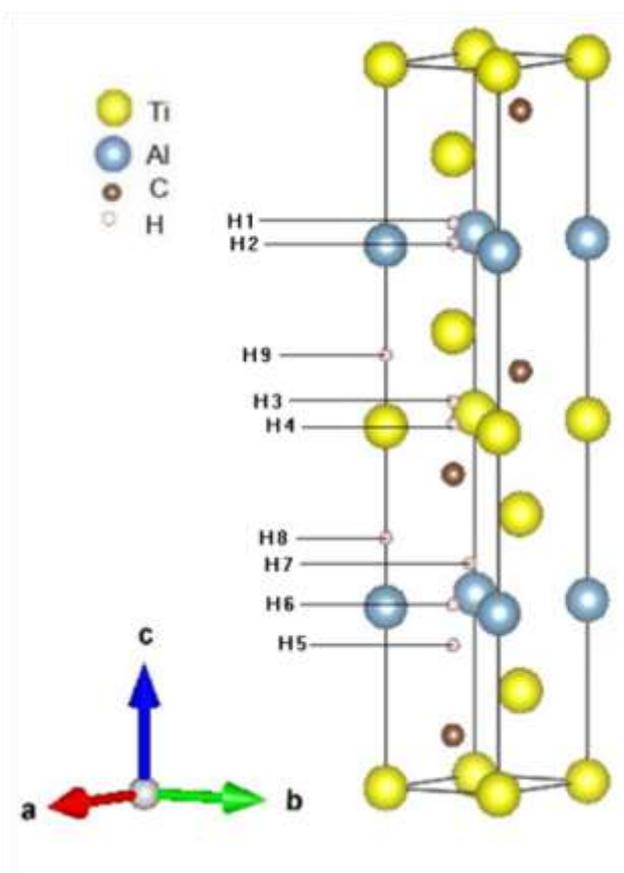


Figure. Sites interstitiels testés pour l'insertion de H dans les phases MAX Ti_3AlC_2 et Ti_3SiC_2

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] Houssam Kharouji, Lucile Dezerard, Pierre Hirel, Philippe Carrez, Patrick Cordier, 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, pp.103990. hal-04471501

VI.6. 2019M4XXX0978 : Mechanisms of energy conversion in collisionless plasmas

Responsable : DEL-SARTO Daniele / Institut Jean Lamour, Nancy

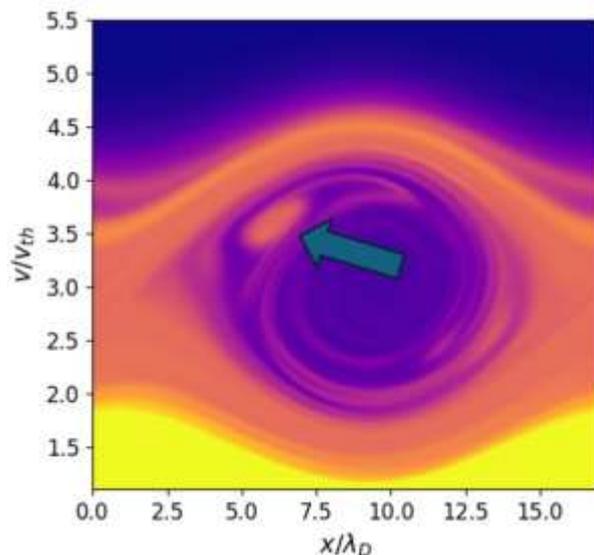


Figure. Des électrons piégés dans le potentiel d'une onde de plasma sans collisions forment des vortex dans l'espace de phase, créant des structures granulaires (flèche) avec des concentrations élevées de particules. Cela entraîne une instabilité de "masse négative", favorisant le chauffage et l'isotropisation des particules.

Plus du 99% de la matière visible dans l'Univers est dans l'état de plasma constitué par électrons et ions en interaction mutuelle, les collisions entre lesquelles sont typiquement très faibles: la majorité des plasmas dans l'espace (qui sont très dilués) et des plasmas dans les expériences de fusion thermonucléaire (qui sont très chauds) ont en fait des taux de collisions négligeables pour intervalles de temps grands par rapport aux échelles de la dynamique. Les

plasmas faiblement collisionnels, dites "de Vlasov", sont donc caractérisés par des processus cinétiques, qui ont lieu souvent hors des conditions d'équilibre thermodynamique, et qui sont caractérisés par des mécanismes de conversion d'énergie entre les composantes cinétiques ordonnées (accélération des faisceaux) et désordonnées (énergie interne/thermique du plasma), et les composantes électromagnétiques (champs électrique et magnétique). Ces processus de conversion d'énergie sont à la base d'une variété d'instabilités, qui déterminent l'évolution et règlent les processus d'auto-organisation des plasmas sans collisions, soit en astrophysique que dans le laboratoire. Dans ce projet, pendant les années solaires 2024 et 2025 nous avons abordé l'étude de ces processus de conversion d'énergie dans 4 contextes principaux: les instabilités de reconnexion magnétique dite de type "cisaillement" qui peuvent intervenir dans le processus de chauffage dans le plasma turbulent, notamment du vent solaire; les instabilités type faisceau-plasma relativiste, qui sont d'intérêt pour les interactions laser-plasmas et dans les faisceaux de particules accélérés en astrophysique autour des objets compacts massifs (ex. étoiles de neutrons); les instabilités de type "interchange" dites "ion temperature driven", qui jouent un rôle clé dans le développement de la turbulence du cœur dans les tokamaks, responsable de la perte du confinement nécessaire pour achever les conditions de fusion thermonucléaire.

Publications :

- [1] H. Betar, D. Del Sarto, Microscopic Current Sheets and Fast Tearing Modes in Plasma Turbulence, *The Astrophysical Journal* 2025, 990, 28. hal-05219245
- [2] J. N. Sama, A. Biancalani, A. Bottino, D. Del Sarto, R. J. Dumont, G. Di Giannatale, A. Ghizzo, T. Hayward-Schneider, Ph. Lauber, B. McMillan, A. Mishchenko, M. Muruggapan, B. Rettino, B. Rofman, F. Vannini, L. Villard, X. Wang, Ion temperature gradient mode mitigation by energetic particles, mediated by forced-driven zonal flows, *Phys. Plasmas* 31, 112503 (2024). hal-04763379
- [3] A. Ghizzo, D. Del Sarto, H. Betar. Collisionless heating in Vlasov plasma and turbulence-driven filamentation aspects. *Physics of Plasmas*, 2024, 31 (7), pp.072109. hal-04655073

VI.7. 2020M4XXX1952 : Propagation stochastique d'une paroi de domaine magnétique

Responsable : MONTAIGNE François

Institut Jean Lamour, Nancy

En première approche, le processus de réaimantation du CoFe en présence de transfert de spin est modélisé par une configuration aléatoire biaisée de l'aimantation. Concrètement, l'aimantation de chaque cellule est initialisée à ± 1 avec une probabilité $\frac{1}{2}(1 \pm \eta)$ puis le système est relaxé vers son état d'équilibre (disque uniformément aimanté). La figure ci-dessous reproduit un exemple de dynamique de l'état désordonné vers l'état monodomaine.

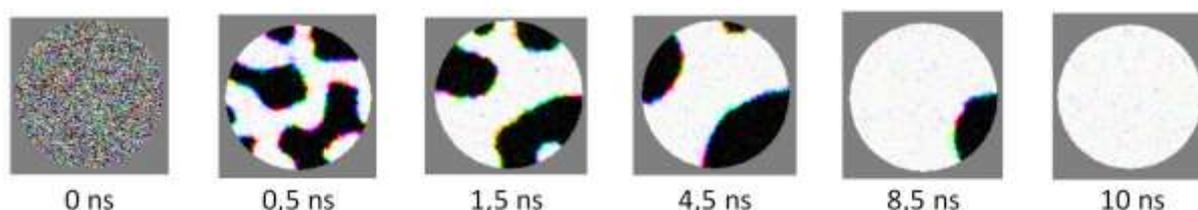


Figure. Remagnetization process of a magnetic nano-disk submitted to an ultrafast spin transfer pulse

Le calcul est reproduit plusieurs centaines de fois afin d'en déduire une probabilité de renversement "macroscopique". Comme le montrent, les courbes ci-dessous, la dépendance de la probabilité de retournement en fonction du diamètre du disque est approximativement exponentielle. Il apparaît que la probabilité est significativement affectée par la taille de cellule (discrétisation) choisie pour la simulation. Il semblerait que le paramètre pertinent soit en fait $\Lambda = 2\eta/a$ (a étant la taille de cellule).

Si ces simulations permettent de reproduire qualitativement les données expérimentales, il n'est pas évident d'investiguer la plage des valeurs expérimentales. En effet, il est très long en temps de calcul de simuler des structures de près de $1 \mu\text{m}$. D'autant plus que pour ces tailles, les probabilités mesurées expérimentalement sont de l'ordre $0,999 - 0,9999$, il est donc nécessaire de simuler plusieurs dizaines de milliers d'évènements pour évaluer de façon satisfaisante les probabilités de renversement. Nous envisageons donc de combiner les simulations micromagnétiques avec une approche de type deep-learning pour pouvoir accélérer considérablement les simulations.

Publications :

Analyse des données en cours.

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

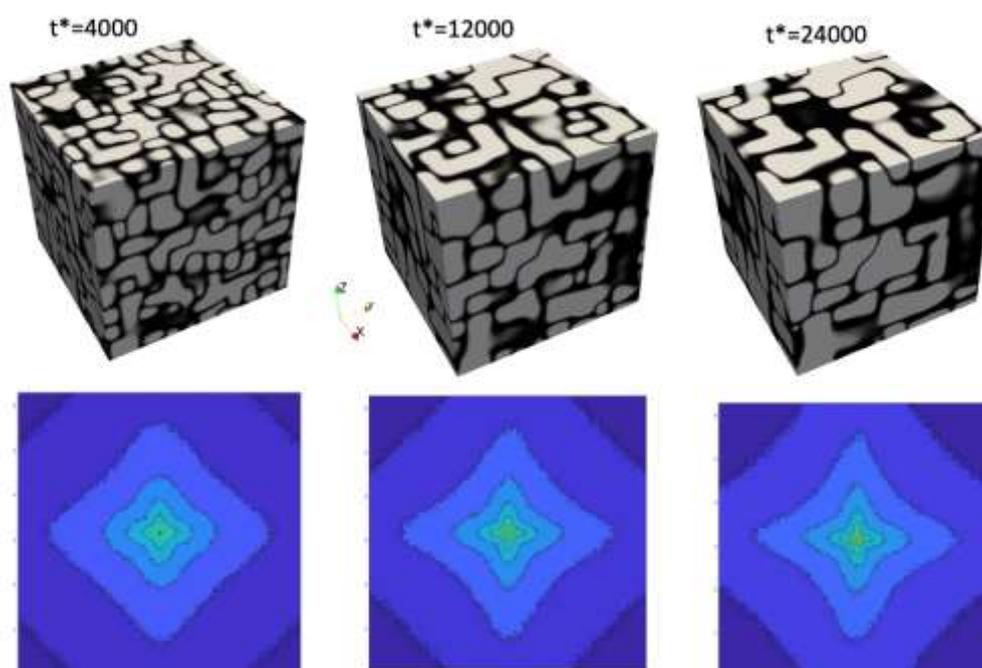


Figure. 3D phase-field simulations and analysis of the generated SAS patterns of Ni-based superalloy microstructures

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] Stéphane Berbenni, Rémi Dingreville, Thomas Schenk. Simulation and analysis of small angle scattering (SAS) patterns of Ni-based superalloy microstructures generated by a phase-field model. Computational Materials Science, 2025, 258, pp.114086. hal-05175812

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

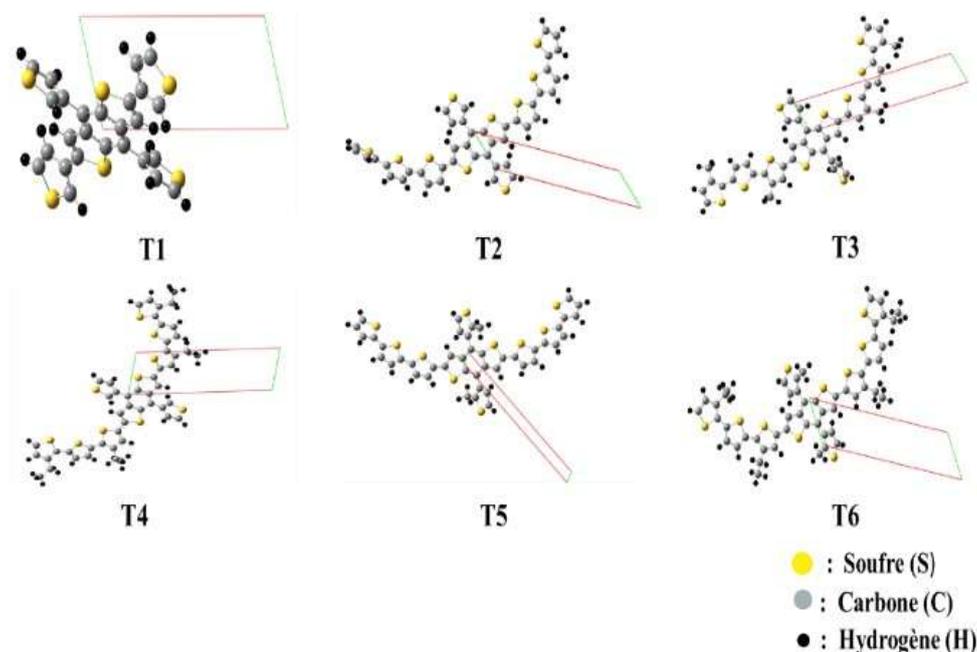


Figure. Représentations des structures géométriques optimisées des six composés organiques à base de thiophène (T1 à T6) dans les conditions périodiques aux limites bidimensionnelles (PBC-2D), obtenues en utilisant la fonctionnelle PBEPBE/6-31G(d,p). Les atomes sont codés en couleur : soufre (S) en jaune, carbone (C) en gris, et hydrogène (H) en noir

Ce travail s'inscrit dans le cadre d'une thèse de doctorat menée au laboratoire L2MSM, Université de Sidi Bel Abbès, Algérie, en collaboration avec le laboratoire LEM3, Université de Lorraine, Metz, France. Il consiste à utiliser des outils de calcul fondés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) pour modéliser les propriétés opto-électroniques de matériaux organiques à structure moléculaire volumineuse. Les moyens de calcul disponibles au laboratoire L2MSM, bien que relativement puissants, restaient insuffisants pour atteindre les objectifs fixés. L'accès aux ressources du centre eXplor, a permis de surmonter ces limites et d'obtenir des résultats satisfaisants. Une série de molécules organiques, comportant des dérivés de thiophène comme électrodonneurs et la dérivée PC61BM du fullerène comme électroaccepteur, a été conçue pour améliorer le rendement des cellules photovoltaïques organiques. L'optimisation géométrique et les propriétés électroniques ont été calculées en utilisant la DFT avec la fonctionnelle B3LYP dans le vide, et la fonctionnelle PBE dans les conditions périodiques (PBC) en 1D et 2D, avec la base 6-31G(d,p). Les propriétés optiques ont été obtenues en utilisant la DFT dépendante du temps (TD-DFT) avec la fonctionnelle B3LYP. Les résultats montrent une bande interdite réduite et des propriétés électroniques et optiques favorables au photovoltaïque organique.

Publications :

- [1] Ilies Taibi, Mohamed Hicham Gafour, Karima Saïl, Ghaouti Bassou, Nabila Maloufi. Theoretical Study of Novel Thiophene-Based Materials under Vacuum and Periodic Conditions for Photovoltaic Applications. *Nanotechnology Perceptions*, 2024, 20 (6), pp.4182-4200. hal-05151713

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

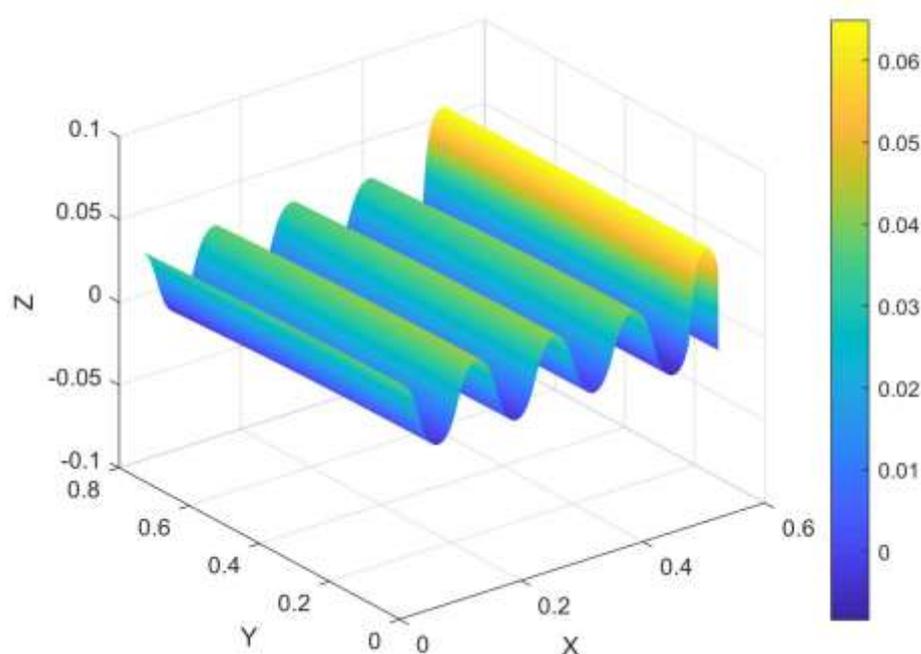


Figure. Déformée de la surface supérieure du film-substrat juste avant la seconde bifurcation (pas MAN 34)

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.

* B. Cochelin, N. Damil, M. Potier Ferry, Méthode asymptotique numérique, Hermès Lavoisier, 2007.

** F. Xu, S. Zhao, C. Lu , M. Potier-Ferry, Pattern selection in core-shell spheres, Journal of Mechanics and Physics of Solids, 137 (2020).

Publications :

En cours de soumission au journal Mathematics MDPI (special issue "Recent developments in numerical methods for Partial Differential Equation" d'un article intitulé : Nonlinear analysis of wrinkles in film-substrate systems by Finite Element Method and Asymptotic Numerical Method.

VI.11. 2020M4XXX1595 : Étude atomistique des défauts dans les cristaux

Responsable : GUENOLE Julien / Laboratoire LEM3, Metz

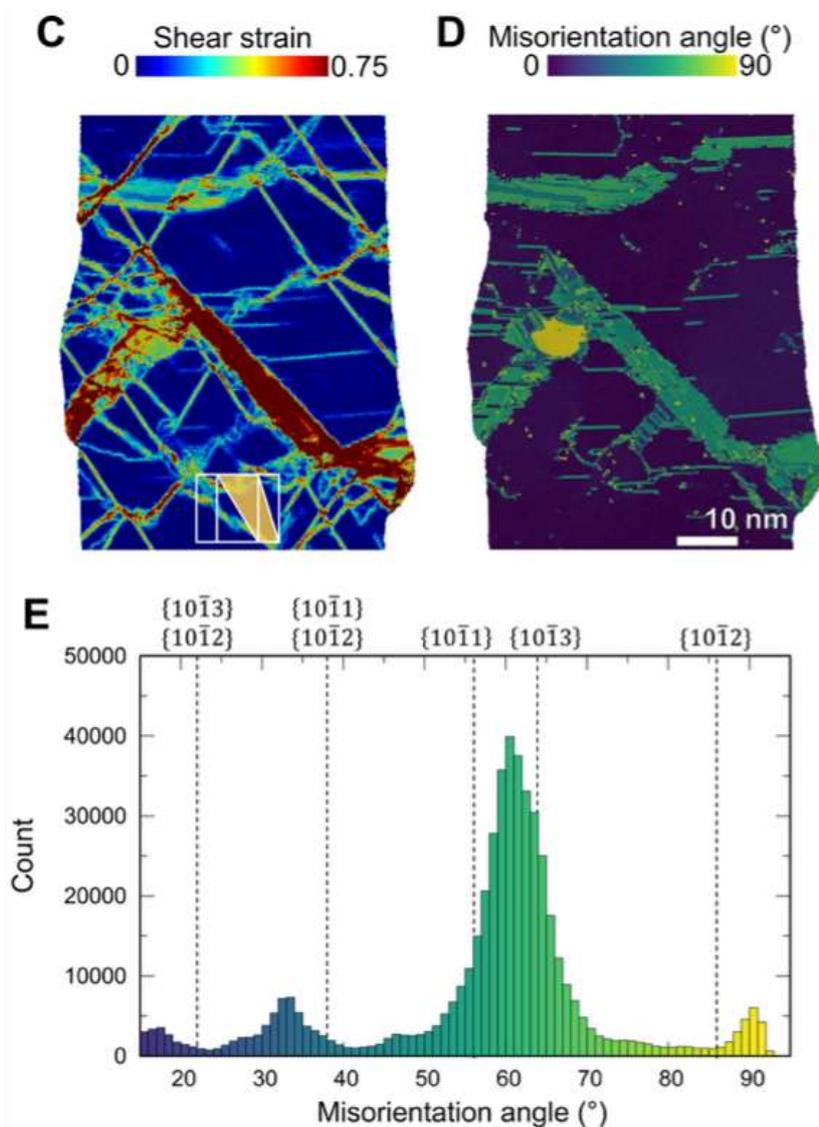


Figure. Avalanche de dislocations et maclage dans des nanopiliers de magnésium par dynamique moléculaire

Dans le contexte de l'étude de la plasticité non basale limitée du magnésium (Mg), les simulations de dynamique moléculaire (MD) apportent un éclairage essentiel à l'échelle atomique. Lors de la compression de nanopiliers orientés selon l'axe c , des dislocations $\langle c+a \rangle$ sont activées sur les plans pyramidaux II. Leurs interactions génèrent des fautes d'empilement basales I1 et I2, qui entravent le glissement subséquent. Cette accumulation de dislocations sessiles provoque des avalanches de dislocations, suivies d'une déformation localisée par maclage.

Publications :

- [1] Jiwon Jeong, Zhuocheng Xie, Markus Alfreider, Sandra Korte-Kerzel, Daniel Kiener, Julien Guénoilé, Sang Ho Oh. Nanoscale mechanisms limiting non-basal plasticity in magnesium. *Acta Materialia*, 2025, 296, pp.121261. hal-04095159

VI.12. 2021M4XXX2438 : Numerical study of the role of « macrozones » in alpha-beta titanium alloys

Responsable : BERBENNI Stéphane

Laboratoire LEM3, Metz

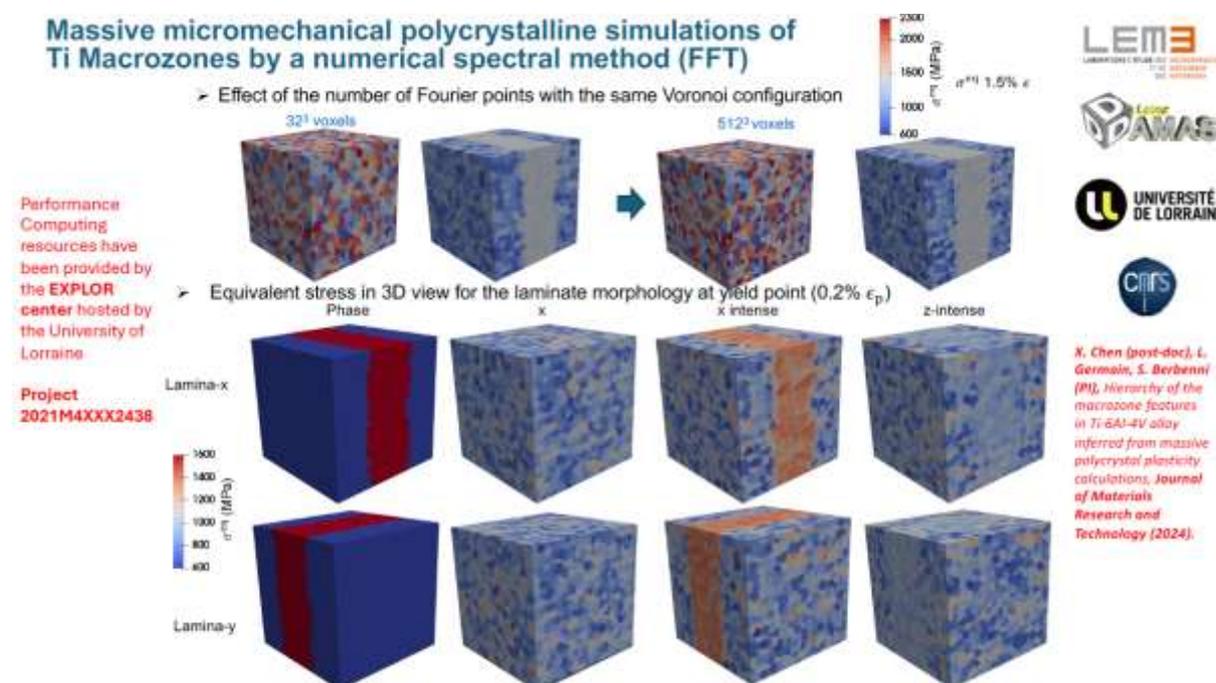


Figure. Massive micromechanical polycrystalline simulations of Ti Macrozones by a numerical spectral method (FFT)

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, L 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*, 2024, 29, pp.2468-2482. hal-04445540

VI.13. 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

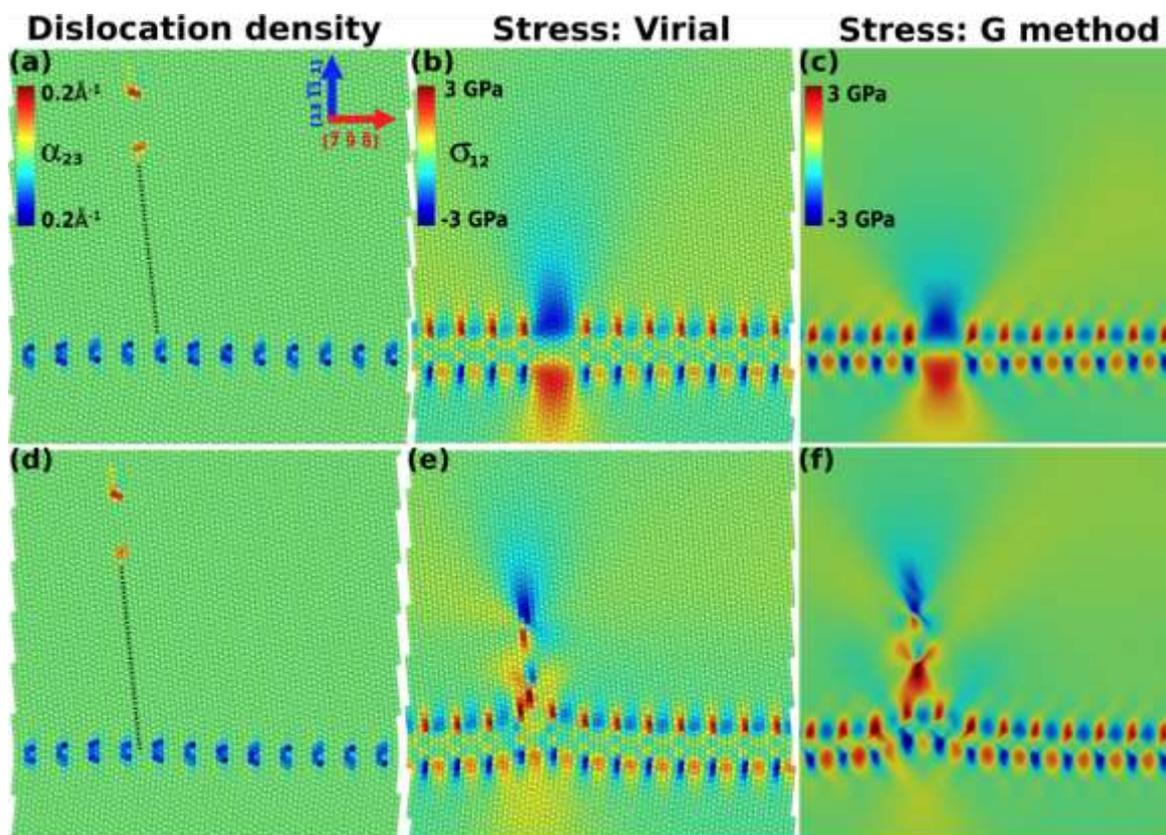


Figure. Interaction entre une dislocation extrinsèque de coin et une frontière de grain bicristalline (STGB) $\Sigma 291(13\ 11\ 1)[1\ 1\ 2]$ à faible angle dans le cuivre, avec deux scénarios : la dislocation de coin s'annihilera avec une composante de la frontière (a, b, c) ; la dislocation de coin s'arrêtera près de la frontière (d, e, f).

La structure atomique des défauts cristallins, comme les dislocations et joints de grains, influence leurs propriétés mécaniques. Pour modéliser ces défauts à l'échelle microstructurale, nous proposons une méthode de passage atomistique-vers-continuum. Celle-ci utilise une densité tensorielle de dislocations de Nye pour représenter les cœurs de défauts et un cadre de mécanique des champs pour calculer les champs mécaniques associés. Basée sur des simulations atomistiques statiques avec des potentiels ab-initio et EAM, cette approche capture précisément les énergies et champs élastiques. Elle permet aussi d'étudier les effets de taille et l'énergie interne liée aux densités de dislocations, avec application aux joints de grains en cuivre et tungstène.

Publications :

- [1] Atomistic to continuum mechanics description of crystal defects with dislocation density fields: Application to dislocations and grain boundaries, H. Kharouji, L. Dezerald, P. Hirel, P. Carrez, P. Cordier, V. Taupin, J. Guénoilé, International Journal of Plasticity 177 (2024) 103990. hal-04471501
- [2] On the atomistic origin of internal length scale in strain-gradient plasticity models: The case of grain boundary structures and energies, H. Kharouji, V. Taupin, J. Guénoilé Acta Materialia 284 (2025) 120555. hal-04806348

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

VII.1. 2019OTELo1277 : Écoulements en milieux poreux et écoulements glaciaire

Responsable : ZAKARI Mustapha

Laboratoire GeoRessources, Vandœuvre-lès-Nancy

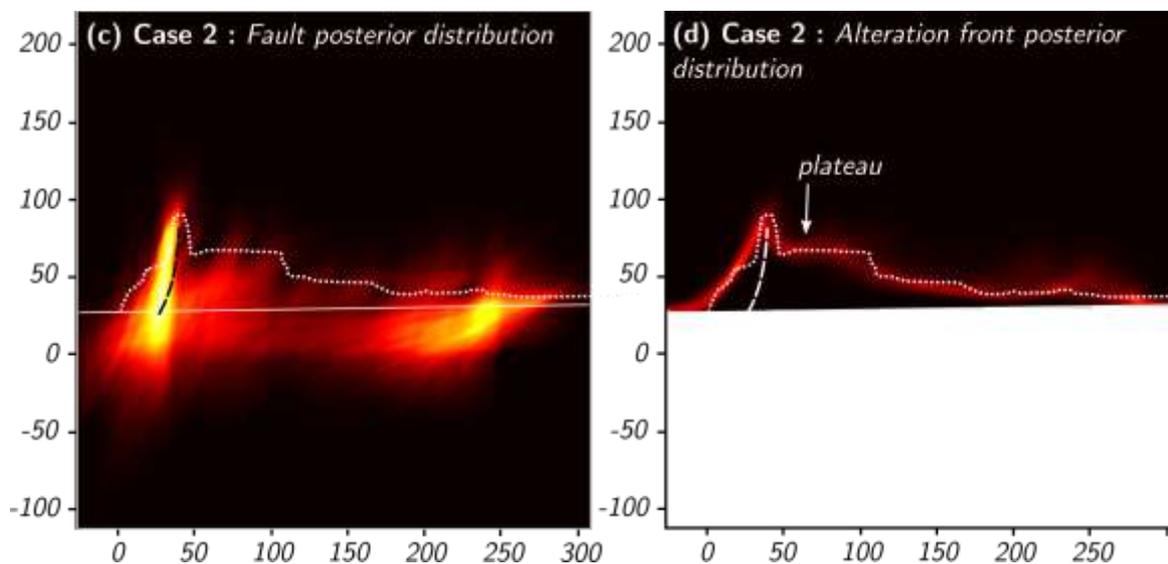


Figure. Reconstitution d'un front d'altération par méthodes de Metropolis-Hastings. (a) E-Type de la position des structures de contrôles; (b) E-Type de la position du front d'altération.

Ce projet porte sur deux thématiques en géosciences numériques. La première se concentre sur l'étude de problématiques paléoclimatiques sur les reliefs glaciaires passés. Dans ce but plusieurs modèles d'écoulement glaciaires rapides (implication + parallélisation sous Matlab) sont en cours de développement pour suivre l'évolution du relief pendant des millions d'années. La deuxième porte sur le calcul rapide d'écoulements en milieux poreux fracturés et ce en relation avec des données de terrain. De nombreuses configurations géologiques sont mises à l'échelle (Upscaled) en utilisant des modèles d'écoulements afin de pouvoir travailler avec des maillages moins lourds et l'upsampling et parallélisé pour obtenir des résultats en temps raisonnables.

Publications :

- [1] Mustapha Zakari, Guillaume Caumon. Upscaling permeability from unstructured meshes to non-matching structured grids. First results. IAMG 21st annual conference, 2022, Nancy, France. hal-04165785
- [2] Pierre Anquez, Mustapha Zakari, et Guillaume Caumon, « Comparing Three DFN Simplification Strategies for Two-Phase Flow Applications », in ECMOR XVII (European Association of Geoscientists & Engineers, 2020), 1-21. hal-03977429
- [3] Guillaume Balarac, Francesca Basile, Pierre Bénard, Felipe Bordeu, Jean-Baptiste Chapelier, et al. Tetrahedral Remeshing in the Context of Large-Scale Numerical Simulation and High Performance Computing. MathematicS In Action, 2022, 11 (1), pp.129-164. hal-03344779
- [4] Paul Marchal et al, 2025 (in review): Stochastic joint modeling of hydrothermal alteration halos and associated geological structures applied to mining studies. hal-05157102

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

Responsable : CUPILLARD Paul / Laboratoire GeoRessources, Vandœuvre-lès-Nancy

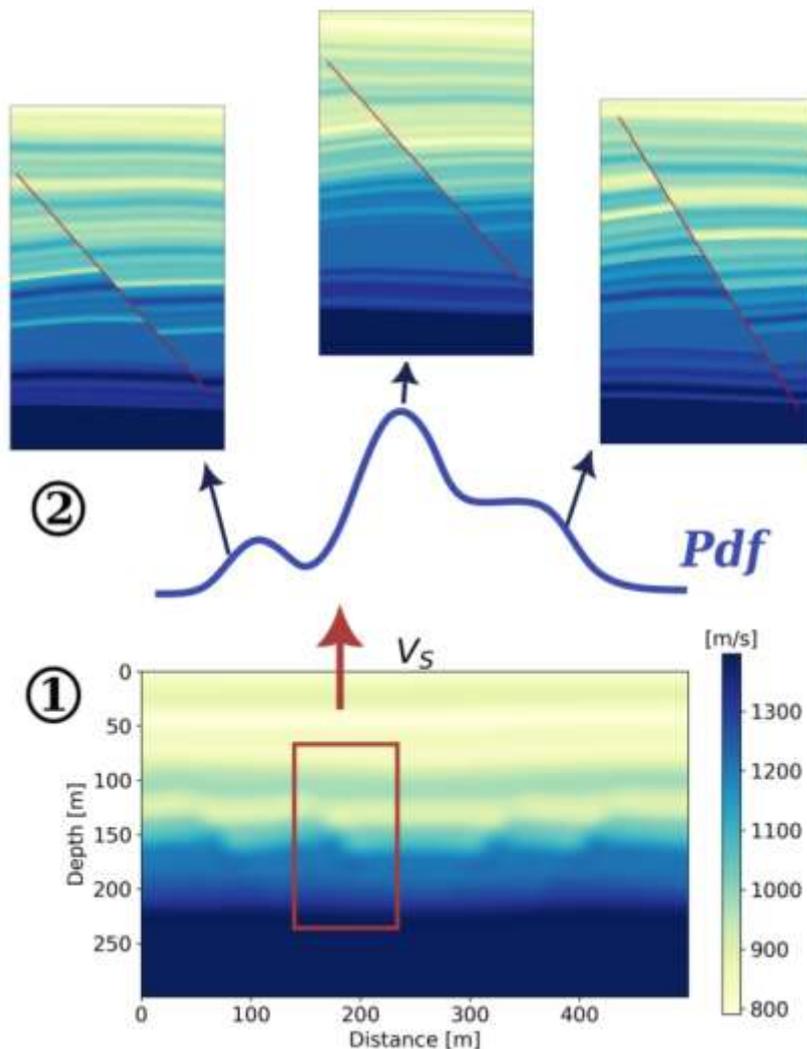


Figure. Principe de la déhomogénéisation : 1) Modèle de vitesse des ondes S (V_s) obtenue par inversion de formes d'onde complètes et qu'il s'agit d'interpréter géologiquement. 2) Densité de probabilité (Pdf) des modèles géologiques compatibles avec 1)

La sismologie consiste essentiellement à étudier la propagation des ondes sismiques dans les milieux géologiques afin d'expliquer et anticiper les effets d'amplification ou de désamplification du champ d'onde dus à certaines structures géologiques, de mieux comprendre les différentes sources sismiques (tremblements de terre, activité volcanique, houle, glissements de terrain, glaciers, etc.) et d'imager les environnements géologiques pour en déduire les géométries, les dynamiques et les ressources éventuelles. Dans ce contexte, la simulation numérique de la propagation des ondes est évidemment cruciale. Le projet consiste en particulier à étudier et mettre en œuvre des techniques de milieux lisses équivalents qui facilitent la simulation de la propagation des ondes dans les environnements complexes.

Publications :

- [1] Marius Rapenne, Paul Cupillard, Guillaume Caumon, Corentin Gouache. Quadrangular adaptive mesh for elastic wave simulation in smooth anisotropic media. *Computers & Geosciences*, 2025, 203, pp.105946. hal-05141647
- [2] Giusi Ruggiero, Paul Cupillard, Guillaume Caumon. Reducing structural uncertainty with inverse homogenization. *Geophysical Journal International*, 2025, submitted.

VIII. Autres

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

Responsible : BARRALES Luis / Georgia Tech, Metz

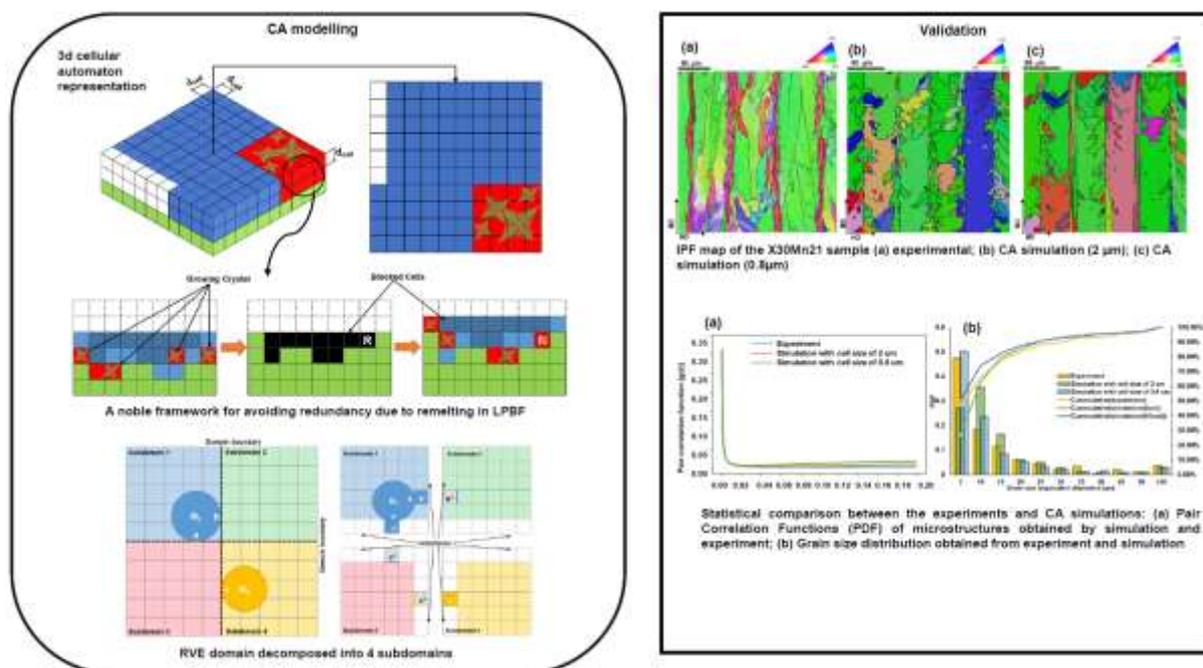


Figure. Process of simulation of additive manufacturing with a high-performance cellular automaton model

Nous avons utilisé le cluster eXplor pour mener à bien deux projets : (a) des simulations de dynamique moléculaire (MD) des propriétés des joints de grains et (b) le développement d'un modèle d'automate cellulaire pour le développement de la microstructure en fabrication additive. Dans le cadre du premier projet, des propriétés telles que l'énergie et la mobilité des joints de grains ont été calculées et corrélées à la structure des joints. Dans ce dernier projet, un modèle pour LPBF a été implémenté avec succès et utilisé pour la simulation du développement de la microstructure d'un acier à haute teneur en manganèse.

Publications :

- [1] J. Chen, J. Xu, J. Moverare, L.A. Barrales-Mora, Effect of the building direction on the high-temperature mechanical properties of an IN738LC superalloy processed by laser-powder bed fusion, *Materials Science and Engineering: A* 909 (2024).
- [2] J.-E. Brandenburg, L.A. Barrales-Mora, S. Tsunekawa, D.A. Molodov, Dynamic behavior of grain boundaries with misorientations in the vicinity of $\Sigma 3$ coherent and incoherent twin boundaries in Al bicrystals, *Acta Mater* 259 (2023), 119272. hal-05223858
- [3] G.B. Bizana, L.A. Barrales-Mora, Kinetics of grain boundary migration in nanosized Al polycrystals, *Acta Mater* 260 (2023). hal-05245229
- [4] G.B. Bizana, L.A. 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 (2023). hal-05245274
- [5] A. Singh, C. Haase, L.A. Barrales-Mora, Cellular automaton simulation model for predicting the microstructure evolution of an additively manufactured X30Mn21 austenitic advanced high strength steel, *Metals* 2025, 15(7), 770. hal-05245308