

Université
de Liège



Le HPC au service de la science des matériaux

Philippe GHOSEZ

Theoretical Materials Physics, CESAM-QMAT

Université de Liège

HPC Meeting - CENAERO- Gosselies

10 octobre 2016

Technologies et société

Nous vivons dans une société où la technologie est omniprésente et en constante évolution.



Technologies et société

Nous vivons dans une société où la technologie est omniprésente et en constante évolution

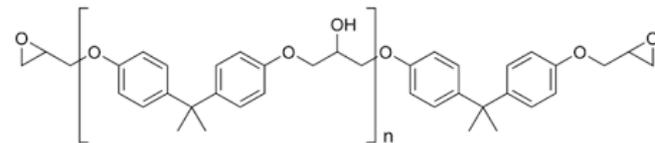
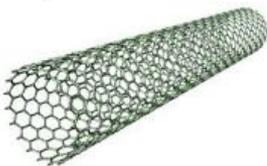
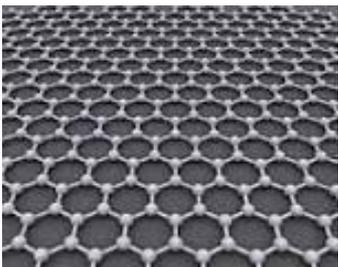
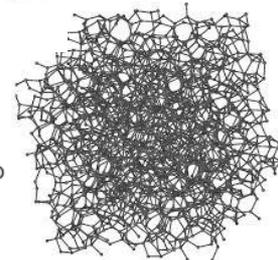
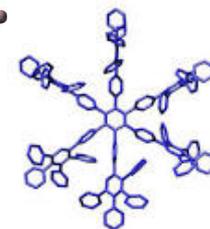
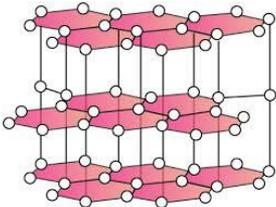
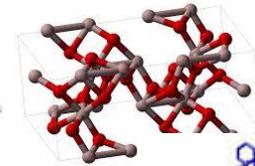
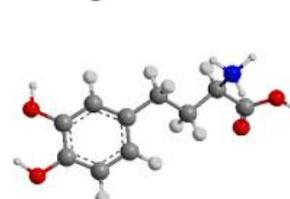
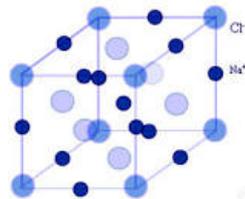
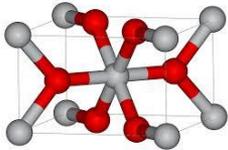
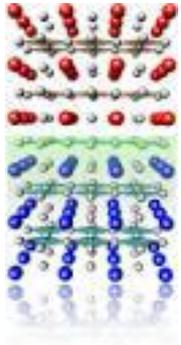
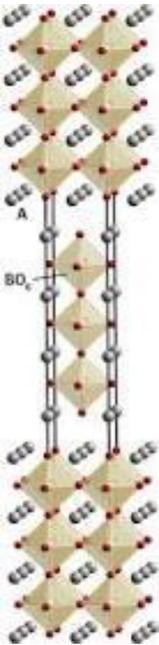
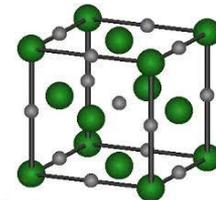
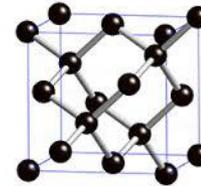
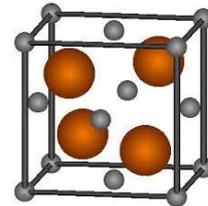
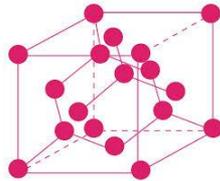
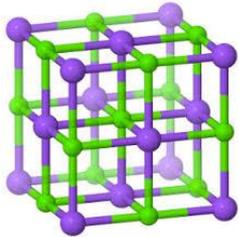
Poursuivre ce développement nécessite de relever de nombreux défis:

- **Technologique** : performances, miniaturisation
- **Economique** : bas prix
- **Environnemental** : non-polluant, recyclable
- **Santé** : non-toxique
- **Energétique** !



Technologies et matériaux

Derrière ces dispositifs, des **matériaux**
aux propriétés spécifiques

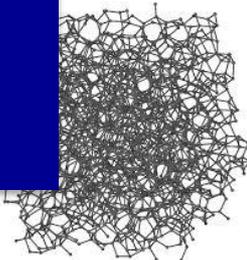
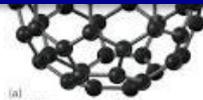
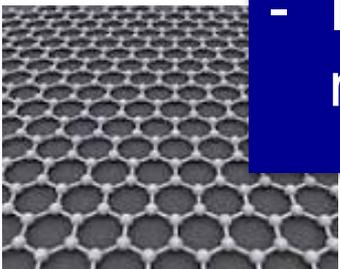
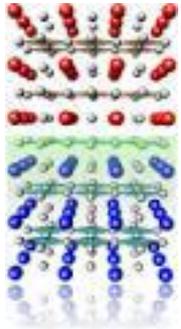
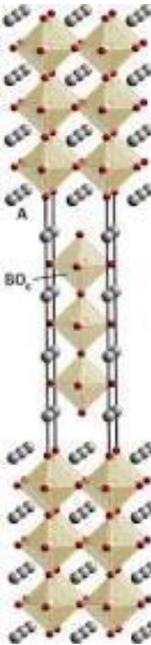
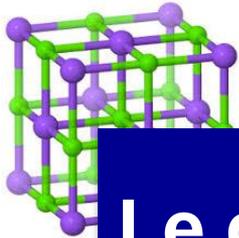


Technologies et matériaux

Derrière ces dispositifs, des **matériaux**
aux propriétés spécifiques

**Le développement technologique
nécessitera d'identifier de nouveaux
matériaux et (nano-)structures.**

- Trouver les matériaux existants les mieux adaptés à certaines applications.
- Inventer de nouveaux matériaux et/ou de nouvelles nanostructures.



Matériaux et atomes

L'alphabet des matériaux, ce sont les atomes eux-mêmes composés de noyaux et d'électrons

Tableau périodique des éléments

1 1 H 1,008 Hydrogène	2 2 He 4,003 Hélium																	18 18 Ar 39,948 Argon																	
3 3 Li 6,941 Lithium	4 4 Be 9,012 Béryllium											13 13 Al 26,981 Aluminium	14 14 Si 28,086 Silicium	15 15 P 30,974 Phosphore	16 16 S 32,06 Soufre	17 17 Cl 35,45 Chlore	18 18 Ne 20,18 Neon																		
11 11 Na 22,99 Sodium	12 12 Mg 24,304 Magnésium	3 3 B 10,811 Bore	4 4 C 12,011 Carbone	5 5 N 14,007 Azote	6 6 O 15,999 Oxygène	7 7 F 18,998 Fluor	8 8 Ne 20,18 Neon	9 9 K 39,098 Potassium	10 10 Ca 40,078 Calcium	11 11 Sc 44,956 Scandium	12 12 Ti 47,88 Titane	13 13 V 50,942 Vanadium	14 14 Cr 51,996 Chrome	15 15 Mn 54,938 Manganèse	16 16 Fe 55,845 Fer	17 17 Co 58,933 Cobalt	18 18 Ni 58,693 Nickel	19 19 Cu 63,546 Cuivre	20 20 Zn 65,38 Zinc	21 21 Ga 69,723 Gallium	22 22 Ge 72,63 Germanium	23 23 As 74,922 Arsenic	24 24 Se 78,96 Sélénium	25 25 Br 79,904 Brome	26 26 Kr 83,8 Krypton										
19 19 K 39,098 Potassium	20 20 Ca 40,078 Calcium	21 21 Sc 44,956 Scandium	22 22 Ti 47,88 Titane	23 23 V 50,942 Vanadium	24 24 Cr 51,996 Chrome	25 25 Mn 54,938 Manganèse	26 26 Fe 55,845 Fer	27 27 Co 58,933 Cobalt	28 28 Ni 58,693 Nickel	29 29 Cu 63,546 Cuivre	30 30 Zn 65,38 Zinc	31 31 Ga 69,723 Gallium	32 32 Ge 72,63 Germanium	33 33 As 74,922 Arsenic	34 34 Se 78,96 Sélénium	35 35 Br 79,904 Brome	36 36 Kr 83,8 Krypton	37 37 Rb 85,468 Rubidium	38 38 Sr 87,62 Strontium	39 39 Y 88,906 Yttrium	40 40 Zr 91,224 Zirconium	41 41 Nb 92,906 Niobium	42 42 Mo 95,94 Molybdène	43 43 Tc 98 Technetium	44 44 Ru 101,07 Ruthénium	45 45 Rh 101,07 Rhodium	46 46 Pd 106,32 Paladium	47 47 Ag 107,868 Argent	48 48 Cd 112,411 Cadmium	49 49 In 114,818 Indium	50 50 Sn 118,710 Étain	51 51 Sb 121,757 Antimoine	52 52 Te 127,6 Tellure	53 53 I 126,905 Iode	54 54 Xe 131,29 Xénon
55 55 Cs 132,905 Césium	56 56 Ba 137,327 Baryum	57 57 La 138,905 Lanthane	58 58 Ce 140,12 Cérum	59 59 Pr 140,908 Praseodyme	60 60 Nd 144,24 Néodyme	61 61 Pm 145 Prométhée	62 62 Sm 150,36 Samarium	63 63 Eu 151,964 Europée	64 64 Gd 157,25 Gadolinium	65 65 Tb 158,925 Terbium	66 66 Dy 162,50 Dysprosium	67 67 Ho 164,930 Holmium	68 68 Er 167,259 Erbium	69 69 Tm 168,930 Thulium	70 70 Yb 173,054 Ytterbium	71 71 Lu 174,967 Lutécium	72 72 Hf 178,49 Hafnium	73 73 Ta 180,948 Tungstène	74 74 W 183,84 Wolfram	75 75 Re 186,207 Rhenium	76 76 Os 190,23 Osmium	77 77 Ir 192,222 Iridium	78 78 Pt 195,084 Platine	79 79 Au 196,967 Or	80 80 Hg 200,59 Mercure	81 81 Tl 204,387 Thallium	82 82 Pb 207,2 Plomb	83 83 Bi 208,98 Bismuth	84 84 Po 209 Polonium	85 85 At 210 Astatine	86 86 Rn 222 Radon				
87 87 Fr 223 Francium	88 88 Ra 226 Radium	89 89 Ac 227 Actinium	90 90 Th 232,037 Thorium	91 91 Pa 231,036 Protactinium	92 92 U 238,029 Uranium	93 93 Np 237 Neptunium	94 94 Pu 244 Plutonium	95 95 Am 243 Americium	96 96 Cm 247 Curium	97 97 Bk 247 Berkélium	98 98 Cf 251 Californium	99 99 Es 252 Einsteinium	100 100 Fm 257 Fermium	101 101 Md 258 Mendelevium	102 102 No 259 Nébulium	103 103 Lr 260 Lawrencium																			

Numéro atomique : **Z** Symbole de l'Élément Masse atomique (Electronegativité)¹
Nom : **Carbone** (12) deux électrons valents

1 (IA) 2 (IIA) 13 (IIIA) 14 (IVA) 15 (VA) 16 (VIA) 17 (VIIA) 18 (VIIIA)

3 (IIIB) 4 (IVB) 5 (VB) 6 (VIB) 7 (VIIB) 8 (VIII) 9 (VIII) 10 (VIII) 11 (IB) 12 (IIB)

19 (I) 20 (II) 21 (III) 22 (IV) 23 (V) 24 (VI) 25 (VII) 26 (VIII) 27 (VIII) 28 (VIII) 29 (IX) 30 (X) 31 (XI) 32 (XII) 33 (IIIB) 34 (IIIB) 35 (IIIB) 36 (IIIB) 37 (I) 38 (II) 39 (III) 40 (IV) 41 (V) 42 (VI) 43 (VII) 44 (VIII) 45 (VIII) 46 (VIII) 47 (IX) 48 (X) 49 (XI) 50 (XII) 51 (IIIB) 52 (IIIB) 53 (IIIB) 54 (IIIB) 55 (I) 56 (II) 57 (III) 58 (IV) 59 (V) 60 (VI) 61 (VII) 62 (VIII) 63 (VIII) 64 (VIII) 65 (IX) 66 (X) 67 (XI) 68 (XII) 69 (IIIB) 70 (IIIB) 71 (IIIB) 72 (IV) 73 (V) 74 (VI) 75 (VII) 76 (VIII) 77 (VIII) 78 (VIII) 79 (IX) 80 (X) 81 (XI) 82 (XII) 83 (IIIB) 84 (IIIB) 85 (IIIB) 86 (IIIB) 87 (I) 88 (II) 89 (III) 90 (IV) 91 (V) 92 (VI) 93 (VII) 94 (VIII) 95 (VIII) 96 (VIII) 97 (IX) 98 (X) 99 (XI) 100 (XII) 101 (IIIB) 102 (IIIB) 103 (IIIB)

1 (IA) 2 (IIA) 3 (IIIB) 4 (IVB) 5 (VB) 6 (VIB) 7 (VIIB) 8 (VIII) 9 (VIII) 10 (VIII) 11 (IB) 12 (IIB) 13 (IIIA) 14 (IVA) 15 (VA) 16 (VIA) 17 (VIIA) 18 (VIIIA)

19 (I) 20 (II) 21 (III) 22 (IV) 23 (V) 24 (VI) 25 (VII) 26 (VIII) 27 (VIII) 28 (VIII) 29 (IX) 30 (X) 31 (XI) 32 (XII) 33 (IIIB) 34 (IIIB) 35 (IIIB) 36 (IIIB) 37 (I) 38 (II) 39 (III) 40 (IV) 41 (V) 42 (VI) 43 (VII) 44 (VIII) 45 (VIII) 46 (VIII) 47 (IX) 48 (X) 49 (XI) 50 (XII) 51 (IIIB) 52 (IIIB) 53 (IIIB) 54 (IIIB) 55 (I) 56 (II) 57 (III) 58 (IV) 59 (V) 60 (VI) 61 (VII) 62 (VIII) 63 (VIII) 64 (VIII) 65 (IX) 66 (X) 67 (XI) 68 (XII) 69 (IIIB) 70 (IIIB) 71 (IIIB) 72 (IV) 73 (V) 74 (VI) 75 (VII) 76 (VIII) 77 (VIII) 78 (VIII) 79 (IX) 80 (X) 81 (XI) 82 (XII) 83 (IIIB) 84 (IIIB) 85 (IIIB) 86 (IIIB) 87 (I) 88 (II) 89 (III) 90 (IV) 91 (V) 92 (VI) 93 (VII) 94 (VIII) 95 (VIII) 96 (VIII) 97 (IX) 98 (X) 99 (XI) 100 (XII) 101 (IIIB) 102 (IIIB) 103 (IIIB)

1 (IA) 2 (IIA) 3 (IIIB) 4 (IVB) 5 (VB) 6 (VIB) 7 (VIIB) 8 (VIII) 9 (VIII) 10 (VIII) 11 (IB) 12 (IIB) 13 (IIIA) 14 (IVA) 15 (VA) 16 (VIA) 17 (VIIA) 18 (VIIIA)

19 (I) 20 (II) 21 (III) 22 (IV) 23 (V) 24 (VI) 25 (VII) 26 (VIII) 27 (VIII) 28 (VIII) 29 (IX) 30 (X) 31 (XI) 32 (XII) 33 (IIIB) 34 (IIIB) 35 (IIIB) 36 (IIIB) 37 (I) 38 (II) 39 (III) 40 (IV) 41 (V) 42 (VI) 43 (VII) 44 (VIII) 45 (VIII) 46 (VIII) 47 (IX) 48 (X) 49 (XI) 50 (XII) 51 (IIIB) 52 (IIIB) 53 (IIIB) 54 (IIIB) 55 (I) 56 (II) 57 (III) 58 (IV) 59 (V) 60 (VI) 61 (VII) 62 (VIII) 63 (VIII) 64 (VIII) 65 (IX) 66 (X) 67 (XI) 68 (XII) 69 (IIIB) 70 (IIIB) 71 (IIIB) 72 (IV) 73 (V) 74 (VI) 75 (VII) 76 (VIII) 77 (VIII) 78 (VIII) 79 (IX) 80 (X) 81 (XI) 82 (XII) 83 (IIIB) 84 (IIIB) 85 (IIIB) 86 (IIIB) 87 (I) 88 (II) 89 (III) 90 (IV) 91 (V) 92 (VI) 93 (VII) 94 (VIII) 95 (VIII) 96 (VIII) 97 (IX) 98 (X) 99 (XI) 100 (XII) 101 (IIIB) 102 (IIIB) 103 (IIIB)

1 (IA) 2 (IIA) 3 (IIIB) 4 (IVB) 5 (VB) 6 (VIB) 7 (VIIB) 8 (VIII) 9 (VIII) 10 (VIII) 11 (IB) 12 (IIB) 13 (IIIA) 14 (IVA) 15 (VA) 16 (VIA) 17 (VIIA) 18 (VIIIA)

19 (I) 20 (II) 21 (III) 22 (IV) 23 (V) 24 (VI) 25 (VII) 26 (VIII) 27 (VIII) 28 (VIII) 29 (IX) 30 (X) 31 (XI) 32 (XII) 33 (IIIB) 34 (IIIB) 35 (IIIB) 36 (IIIB) 37 (I) 38 (II) 39 (III) 40 (IV) 41 (V) 42 (VI) 43 (VII) 44 (VIII) 45 (VIII) 46 (VIII) 47 (IX) 48 (X) 49 (XI) 50 (XII) 51 (IIIB) 52 (IIIB) 53 (IIIB) 54 (IIIB) 55 (I) 56 (II) 57 (III) 58 (IV) 59 (V) 60 (VI) 61 (VII) 62 (VIII) 63 (VIII) 64 (VIII) 65 (IX) 66 (X) 67 (XI) 68 (XII) 69 (IIIB) 70 (IIIB) 71 (IIIB) 72 (IV) 73 (V) 74 (VI) 75 (VII) 76 (VIII) 77 (VIII) 78 (VIII) 79 (IX) 80 (X) 81 (XI) 82 (XII) 83 (IIIB) 84 (IIIB) 85 (IIIB) 86 (IIIB) 87 (I) 88 (II) 89 (III) 90 (IV) 91 (V) 92 (VI) 93 (VII) 94 (VIII) 95 (VIII) 96 (VIII) 97 (IX) 98 (X) 99 (XI) 100 (XII) 101 (IIIB) 102 (IIIB) 103 (IIIB)

1 (IA) 2 (IIA) 3 (IIIB) 4 (IVB) 5 (VB) 6 (VIB) 7 (VIIB) 8 (VIII) 9 (VIII) 10 (VIII) 11 (IB) 12 (IIB) 13 (IIIA) 14 (IVA) 15 (VA) 16 (VIA) 17 (VIIA) 18 (VIIIA)

19 (I) 20 (II) 21 (III) 22 (IV) 23 (V) 24 (VI) 25 (VII) 26 (VIII) 27 (VIII) 28 (VIII) 29 (IX) 30 (X) 31 (XI) 32 (XII) 33 (IIIB) 34 (IIIB) 35 (IIIB) 36 (IIIB) 37 (I) 38 (II) 39 (III) 40 (IV) 41 (V) 42 (VI) 43 (VII) 44 (VIII) 45 (VIII) 46 (VIII) 47 (IX) 48 (X) 49 (XI) 50 (XII) 51 (IIIB) 52 (IIIB) 53 (IIIB) 54 (IIIB) 55 (I) 56 (II) 57 (III) 58 (IV) 59 (V) 60 (VI) 61 (VII) 62 (VIII) 63 (VIII) 64 (VIII) 65 (IX) 66 (X) 67 (XI) 68 (XII) 69 (IIIB) 70 (IIIB) 71 (IIIB) 72 (IV) 73 (V) 74 (VI) 75 (VII) 76 (VIII) 77 (VIII) 78 (VIII) 79 (IX) 80 (X) 81 (XI) 82 (XII) 83 (IIIB) 84 (IIIB) 85 (IIIB) 86 (IIIB) 87 (I) 88 (II) 89 (III) 90 (IV) 91 (V) 92 (VI) 93 (VII) 94 (VIII) 95 (VIII) 96 (VIII) 97 (IX) 98 (X) 99 (XI) 100 (XII) 101 (IIIB) 102 (IIIB) 103 (IIIB)

1 (IA) 2 (IIA) 3 (IIIB) 4 (IVB) 5 (VB) 6 (VIB) 7 (VIIB) 8 (VIII) 9 (VIII) 10 (VIII) 11 (IB) 12 (IIB) 13 (IIIA) 14 (IVA) 15 (VA) 16 (VIA) 17 (VIIA) 18 (VIIIA)

19 (I) 20 (II) 21 (III) 22 (IV) 23 (V) 24 (VI) 25 (VII) 26 (VIII) 27 (VIII) 28 (VIII) 29 (IX) 30 (X) 31 (XI) 32 (XII) 33 (IIIB) 34 (IIIB) 35 (IIIB) 36 (IIIB) 37 (I) 38 (II) 39 (III) 40 (IV) 41 (V) 42 (VI) 43 (VII) 44 (VIII) 45 (VIII) 46 (VIII) 47 (IX) 48 (X) 49 (XI) 50 (XII) 51 (IIIB) 52 (IIIB) 53 (IIIB) 54 (IIIB) 55 (I) 56 (II) 57 (III) 58 (IV) 59 (V) 60 (VI) 61 (VII) 62 (VIII) 63 (VIII) 64 (VIII) 65 (IX) 66 (X) 67 (XI) 68 (XII) 69 (IIIB) 70 (IIIB) 71 (IIIB) 72 (IV) 73 (V) 74 (VI) 75 (VII) 76 (VIII) 77 (VIII) 78 (VIII) 79 (IX) 80 (X) 81 (XI) 82 (XII) 83 (IIIB) 84 (IIIB) 85 (IIIB) 86 (IIIB) 87 (I) 88 (II) 89 (III) 90 (IV) 91 (V) 92 (VI) 93 (VII) 94 (VIII) 95 (VIII) 96 (VIII) 97 (IX) 98 (X) 99 (XI) 100 (XII) 101 (IIIB) 102 (IIIB) 103 (IIIB)

1 (IA) 2 (IIA) 3 (IIIB) 4 (IVB) 5 (VB) 6 (VIB) 7 (VIIB) 8 (VIII) 9 (VIII) 10 (VIII) 11 (IB) 12 (IIB) 13 (IIIA) 14 (IVA) 15 (VA) 16 (VIA) 17 (VIIA) 18 (VIIIA)

19 (I) 20 (II) 21 (III) 22 (IV) 23 (V) 24 (VI) 25 (VII) 26 (VIII) 27 (VIII) 28 (VIII) 29 (IX) 30 (X) 31 (XI) 32 (XII) 33 (IIIB) 34 (IIIB) 35 (IIIB) 36 (IIIB) 37 (I) 38 (II) 39 (III) 40 (IV) 41 (V) 42 (VI) 43 (VII) 44 (VIII) 45 (VIII) 46 (VIII) 47 (IX) 48 (X) 49 (XI) 50 (XII) 51 (IIIB) 52 (IIIB) 53 (IIIB) 54 (IIIB) 55 (I) 56 (II) 57 (III) 58 (IV) 59 (V) 60 (VI) 61 (VII) 62 (VIII) 63 (VIII) 64 (VIII) 65 (IX) 66 (X) 67 (XI) 68 (XII) 69 (IIIB) 70 (IIIB) 71 (IIIB) 72 (IV) 73 (V) 74 (VI) 75 (VII) 76 (VIII) 77 (VIII) 78 (VIII) 79 (IX) 80 (X) 81 (XI) 82 (XII) 83 (IIIB) 84 (IIIB) 85 (IIIB) 86 (IIIB) 87 (I) 88 (II) 89 (III) 90 (IV) 91 (V) 92 (VI) 93 (VII) 94 (VIII) 95 (VIII) 96 (VIII) 97 (IX) 98 (X) 99 (XI) 100 (XII) 101 (IIIB) 102 (IIIB) 103 (IIIB)

1 (IA) 2 (IIA) 3 (IIIB) 4 (IVB) 5 (VB) 6 (VIB) 7 (VIIB) 8 (VIII) 9 (VIII) 10 (VIII) 11 (IB) 12 (IIB) 13 (IIIA) 14 (IVA) 15 (VA) 16 (VIA) 17 (VIIA) 18 (VIIIA)

19 (I) 20 (II) 21 (III) 22 (IV) 23 (V) 24 (VI) 25 (VII) 26 (VIII) 27 (VIII) 28 (VIII) 29 (IX) 30 (X) 31 (XI) 32 (XII) 33 (IIIB) 34 (IIIB) 35 (IIIB) 36 (IIIB) 37 (I) 38 (II) 39 (III) 40 (IV) 41 (V) 42 (VI) 43 (VII) 44 (VIII) 45 (VIII) 46 (VIII) 47 (IX) 48 (X) 49 (XI) 50 (XII) 51 (IIIB) 52 (IIIB) 53 (IIIB) 54 (IIIB) 55 (I) 56 (II) 57 (III) 58 (IV) 59 (V) 60 (VI) 61 (VII) 62 (VIII) 63 (VIII) 64 (VIII) 65 (IX) 66 (X) 67 (XI) 68 (XII) 69 (IIIB) 70 (IIIB) 71 (IIIB) 72 (IV) 73 (V) 74 (VI) 75 (VII) 76 (VIII) 77 (VIII) 78 (VIII) 79 (IX) 80 (X) 81 (XI) 82 (XII) 83 (IIIB) 84 (IIIB) 85 (IIIB) 86 (IIIB) 87 (I) 88 (II) 89 (III) 90 (IV) 91 (V) 92 (VI) 93 (VII) 94 (VIII) 95 (VIII) 96 (VIII) 97 (IX) 98 (X) 99 (XI) 100 (XII) 101 (IIIB) 102 (IIIB) 103 (IIIB)

1 (IA) 2 (IIA) 3 (IIIB) 4 (IVB) 5 (VB) 6 (VIB) 7 (VIIB) 8 (VIII) 9 (VIII) 10 (VIII) 11 (IB) 12 (IIB) 13 (IIIA) 14 (IVA) 15 (VA) 16 (VIA) 17 (VIIA) 18 (VIIIA)

19 (I) 20 (II) 21 (III) 22 (IV) 23 (V) 24 (VI) 25 (VII) 26 (VIII) 27 (VIII) 28 (VIII) 29 (IX) 30 (X) 31 (XI) 32 (XII) 33 (IIIB) 34 (IIIB) 35 (IIIB) 36 (IIIB) 37 (I) 38 (II) 39 (III) 40 (IV) 41 (V) 42 (VI) 43 (VII) 44 (VIII) 45 (VIII) 46 (VIII) 47 (IX) 48 (X) 49 (XI) 50 (XII) 51 (IIIB) 52 (IIIB) 53 (IIIB) 54 (IIIB) 55 (I) 56 (II) 57 (III) 58 (IV) 59 (V) 60 (VI) 61 (VII) 62 (VIII) 63 (VIII) 64 (VIII) 65 (IX) 66 (X) 67 (XI) 68 (XII) 69 (IIIB) 70 (IIIB) 71 (IIIB) 72 (IV) 73 (V) 74 (VI) 75 (VII) 76 (VIII) 77 (VIII) 78 (VIII) 79 (IX) 80 (X) 81 (XI) 82 (XII) 83 (IIIB) 84 (IIIB) 85 (IIIB) 86 (IIIB) 87 (I) 88 (II) 89 (III) 90 (IV) 91 (V) 92 (VI) 93 (VII) 94 (VIII) 95 (VIII) 96 (VIII) 97 (IX) 98 (X) 99 (XI) 100 (XII) 101 (IIIB) 102 (IIIB) 103 (IIIB)

1 (IA) 2 (IIA) 3 (IIIB) 4 (IVB) 5 (VB) 6 (VIB) 7 (VIIB) 8 (VIII) 9 (VIII) 10 (VIII) 11 (IB) 12 (IIB) 13 (IIIA) 14 (IVA) 15 (VA) 16 (VIA) 17 (VIIA) 18 (VIIIA)

19 (I) 20 (II) 21 (III) 22 (IV) 23 (V) 24 (VI) 25 (VII) 26 (VIII) 27 (VIII) 28 (VIII) 29 (IX) 30 (X) 31 (XI) 32 (XII) 33 (IIIB) 34 (IIIB) 35 (IIIB) 36 (IIIB) 37 (I) 38 (II) 39 (III) 40 (IV) 41 (V) 42 (VI) 43 (VII) 44 (VIII) 45 (VIII) 46 (VIII) 47 (IX) 48 (X) 49 (XI) 50 (XII) 51 (IIIB) 52 (IIIB) 53 (IIIB) 54 (IIIB) 55 (I) 56 (II) 57 (III) 58 (IV) 59 (V) 60 (VI) 61 (VII) 62 (VIII) 63 (VIII) 64 (VIII) 65 (IX) 66 (X) 67 (XI) 68 (XII) 69 (IIIB) 70 (IIIB) 71 (IIIB) 72 (IV) 73 (V) 74 (VI) 75 (VII) 76 (VIII) 77 (VIII) 78 (VIII) 79 (IX) 80 (X) 81 (XI) 82 (XII) 83 (IIIB) 84 (IIIB) 85 (IIIB) 86 (IIIB) 87 (I) 88 (II) 89 (III) 90 (IV) 91 (V) 92 (VI) 93 (VII) 94 (VIII) 95 (VIII) 96 (VIII) 97 (IX) 98 (X) 99 (XI) 100 (XII) 101 (IIIB) 102 (IIIB) 103 (IIIB)

1 (IA) 2 (IIA) 3 (IIIB) 4 (IVB) 5 (VB) 6 (VIB) 7 (VIIB) 8 (VIII) 9 (VIII) 10 (VIII) 11 (IB) 12 (IIB) 13 (IIIA) 14 (IVA) 15 (VA) 16 (VIA) 17 (VIIA) 18 (VIIIA)

19 (I) 20 (II) 21 (III) 22 (IV) 23 (V) 24 (VI) 25 (VII) 26 (VIII) 27 (VIII) 28 (VIII) 29 (IX) 30 (X) 31 (XI) 32 (XII) 33 (IIIB) 34 (IIIB) 35 (IIIB) 36 (IIIB) 37 (I) 38 (II) 39 (III) 40 (IV) 41 (V) 42 (VI) 43 (VII) 44 (VIII) 45 (VIII) 46 (VIII) 47 (IX) 48 (X) 49 (XI) 50 (XII) 51 (IIIB) 52 (IIIB) 53 (IIIB) 54 (IIIB) 55 (I) 56 (II) 57 (III) 58 (IV) 59 (V) 60 (VI) 61 (VII) 62 (VIII) 63 (VIII) 64 (VIII) 65 (IX) 66 (X) 67 (XI) 68 (XII) 69 (IIIB) 70 (IIIB) 71 (IIIB) 72 (IV) 73 (V) 74 (VI) 75 (VII) 76 (VIII) 77 (VIII) 78 (VIII) 79 (IX) 80 (X) 81 (XI) 82 (XII) 83 (IIIB) 84 (IIIB) 85 (IIIB) 86 (IIIB) 87 (I) 88 (II) 89 (III) 90 (IV) 91 (V) 92 (VI) 93 (VII) 94 (VIII) 95 (VIII) 96 (VIII) 97 (IX) 98 (X) 99 (XI) 100 (XII) 101 (IIIB) 102 (IIIB) 103 (IIIB)

1 (IA) 2 (IIA) 3 (IIIB) 4 (IVB) 5 (VB) 6 (VIB) 7 (VIIB) 8 (VIII) 9 (VIII) 10 (VIII) 11 (IB) 12 (IIB) 13 (IIIA) 14 (IVA) 15 (VA) 16 (VIA) 17 (VIIA) 18 (VIIIA)

19 (I) 20 (II) 21 (III) 22 (IV) 23 (V) 24 (VI) 25 (VII) 26 (VIII) 27 (VIII) 28 (VIII) 29 (IX) 30 (X) 31 (XI) 32 (XII) 33 (IIIB) 34 (IIIB) 35 (IIIB) 36 (IIIB) 37 (I) 38 (II) 39 (III) 40 (IV) 41 (V) 42 (VI) 43 (VII) 44 (VIII) 45 (VIII) 46 (VIII) 47 (IX) 48 (X) 49 (XI) 50 (XII) 51 (IIIB) 52 (IIIB) 53 (IIIB) 54 (IIIB) 55 (I) 56 (II) 57 (III) 58 (IV) 59 (V) 60 (VI) 61 (VII) 62 (VIII) 63 (VIII) 64 (VIII) 65 (IX) 66 (X) 67 (XI) 68 (XII) 69 (IIIB) 70 (IIIB) 71 (IIIB) 72 (IV) 73 (V) 74 (VI) 75 (VII) 76 (VIII) 77 (VIII) 78 (VIII) 79 (IX) 80 (X) 81 (XI) 82 (XII) 83 (IIIB) 84 (IIIB) 85 (IIIB) 86 (IIIB) 87 (I) 88 (II) 89 (III) 90 (IV) 91 (V) 92 (VI) 93 (VII) 94 (VIII) 95 (VIII) 96 (VIII) 97 (IX) 98 (X) 99 (XI) 100 (XII) 101 (IIIB) 102 (IIIB) 103 (IIIB)

1 (IA) 2 (IIA) 3 (IIIB) 4 (IVB) 5 (VB) 6 (VIB) 7 (VIIB) 8 (VIII) 9 (VIII) 10 (VIII) 11 (IB) 12 (IIB) 13 (IIIA) 14 (IVA) 15 (VA) 16 (VIA) 17 (VIIA) 18 (VIIIA)

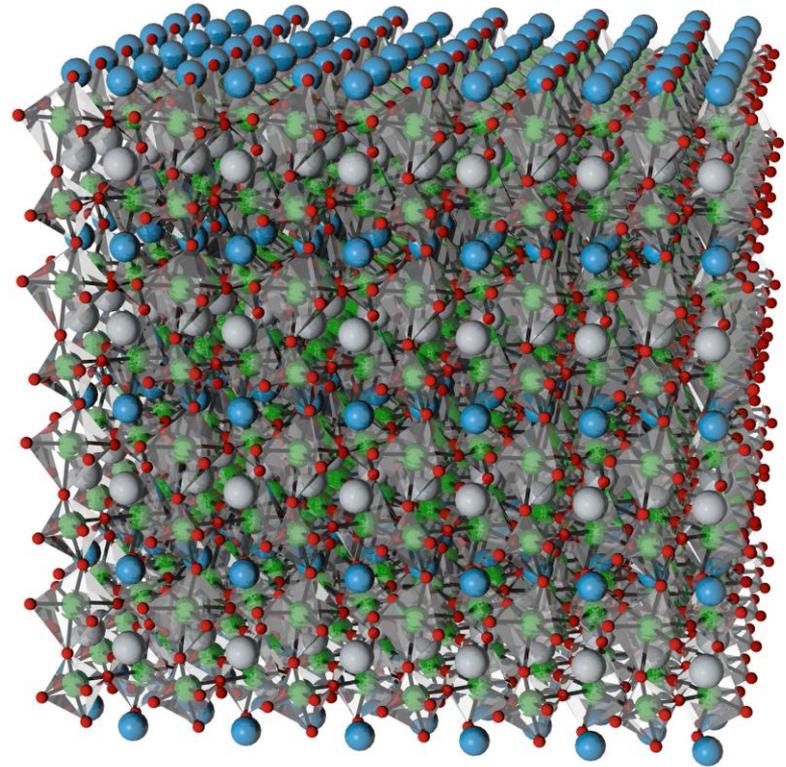
19 (I) 20 (II) 21 (III) 22 (IV) 23 (V) 24 (VI) 25 (VII) 26 (VIII) 27 (VIII) 28 (VIII) 29 (IX) 30 (X) 31 (XI) 32 (XII) 33 (IIIB) 34 (IIIB) 35 (IIIB) 36 (IIIB) 37 (I) 38 (II) 39 (III) 40 (IV) 41 (V) 42 (VI) 43 (VII) 44 (VIII) 45 (VIII) 46 (VIII) 47 (IX) 48 (X) 49 (XI) 50 (XII) 51 (IIIB) 52 (IIIB) 53 (IIIB) 54 (IIIB) 55 (I) 56 (II) 57 (III) 58 (IV) 59 (V) 60 (VI) 61 (VII) 62 (VIII) 63 (VIII) 64 (VIII) 65 (IX) 66 (X) 67 (XI) 68 (XII) 69 (IIIB) 70 (IIIB) 71 (IIIB) 72 (IV) 73 (V) 74 (VI) 75 (VII) 76 (VIII) 77 (VIII) 78 (VIII) 79 (IX) 80 (X) 81 (XI) 82 (XII) 83 (IIIB) 84 (IIIB) 85 (IIIB) 86 (IIIB) 87 (I) 88 (II) 89 (III) 90 (IV) 91 (V) 92 (VI) 93 (VII) 94 (VIII) 95 (VIII) 96 (VIII) 97 (IX) 98 (X) 99 (XI) 100 (XII) 101 (IIIB) 102 (IIIB) 103 (IIIB)

1 (IA) 2 (IIA) 3 (IIIB) 4 (IVB) 5 (VB) 6 (VIB) 7 (VIIB) 8 (VIII) 9 (VIII) 10 (VIII) 11 (IB) 12 (IIB) 13 (IIIA) 14 (IVA) 15 (VA) 16 (VIA) 17 (VIIA) 18 (VIIIA)

19 (I) 20 (II) 21 (III) 22 (IV) 23 (V) 24 (VI) 25 (VII) 26 (VIII) 27 (VIII) 28 (VIII) 29 (IX) 30 (X) 31 (XI) 32 (XII) 33 (IIIB) 34 (IIIB) 35 (IIIB) 36 (IIIB) 37 (I) 38 (II) 39 (III) 40 (IV) 41 (V) 42 (VI) 43 (VII) 44 (VIII) 45 (VIII) 46 (VIII) 47 (IX) 48 (X) 49 (XI) 50 (XII) 51 (IIIB) 52 (IIIB) 53 (IIIB) 54 (IIIB) 55 (I) 56 (II) 57 (III) 58 (IV) 59 (V) 60 (VI) 61 (VII) 62 (VIII) 63 (VIII) 64 (VIII) 65 (IX) 66 (X) 67 (XI) 68 (XII) 69 (IIIB) 70 (IIIB) 71 (IIIB) 72 (IV) 73 (V) 74 (VI) 75 (VII) 76 (VIII) 77 (VIII) 78 (VIII) 79 (IX) 80 (X) 81 (XI) 82 (

Matériaux et atomes

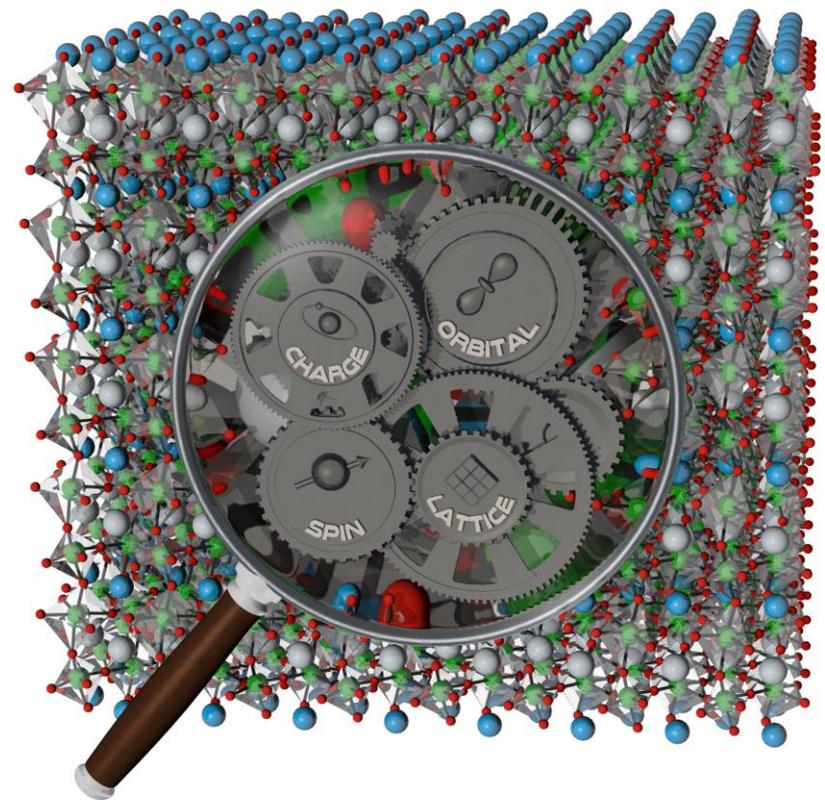
Découvrir le « bon » matériau nécessite
d'aller au-delà de l'intuition !



Matériaux et atomes

Découvrir le « bon » matériau nécessite d'aller au-delà de l'intuition !

Disposer d'outils qui, tels **une loupe**, permettent de **comprendre** et de **prédire** ce qui se passe au cœur même des matériaux.



Modélisation ab initio

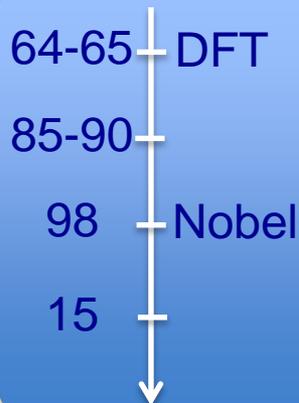
- **Théorie microscopique : mécanique quantique**

Système d'électrons et de noyaux en interaction régit par :

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$$

Impossible à résoudre en pratique !

- **Théorie de la fonctionnelle de la densité**



$$\left\{ \begin{array}{l} \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + v_s \right] |\psi_i\rangle = \epsilon_i |\psi_i\rangle \\ v_s(\mathbf{r}) = v_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \int \frac{n(\mathbf{r}_1)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}|} d\mathbf{r}_1 + \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(\mathbf{r})} \\ n(\mathbf{r}) = \sum_i^{\text{occ}} \psi_i^*(\mathbf{r}) \cdot \psi_i(\mathbf{r}) \end{array} \right.$$

Simplifier la description en considérant la densité électronique comme la variable fondamentale.



Walter Kohn
Nobel de Chimie 1998

www.abinit.org



Un logiciel *open-source* implémentant la DFT pour modéliser les propriétés des matériaux



- « **Advisory board** » international (Belgique, France, Suisse, USA, Canada, Japon)
- Gestion professionnelle (portabilité, parallélisme, tests, ...)
- Tutorats en ligne, écoles, forum
- Communauté de **40 développeurs** et **1500 utilisateurs**
- **4500 citations** scientifiques

Une « success story » wallonne à l'initiative du Pr. Xavier Gonze (UCL) récompensée aux niveaux belge (Prix Quinquennal du FNRS) et international (Fellow of the American Physical Society).



X. Gonze

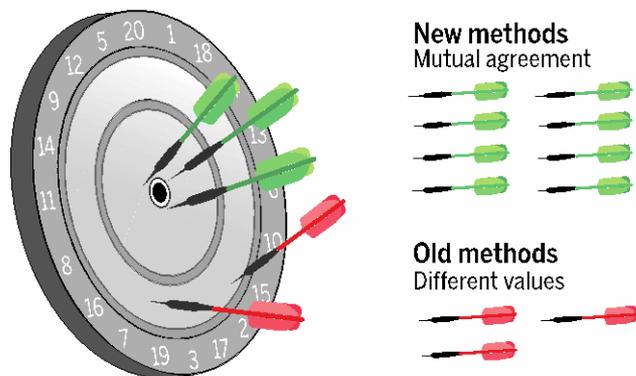
La DFT une méthode fiable !

RESEARCH ARTICLE SUMMARY

DFT METHODS

Reproducibility in density functional theory calculations of solids

Recent DFT methods yield reproducible results.



editorial

Boosting materials modelling

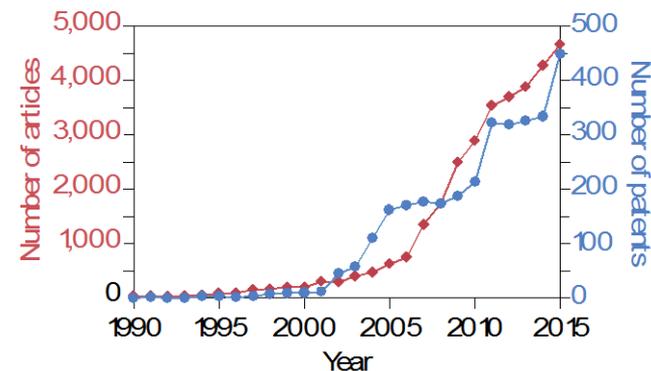


Figure 1 | Number of articles and patents in materials science including the term “density functional theory” published per year during the past 25 years. Article data taken from Scopus, patent data taken from Patentscope.

La DFT une méthode fiable !

RESEARCH ARTICLE SUMMARY

DFT METHODS

Reproducibility in density functional theory calculations of solids

Recent DFT methods yield reproducible results.

Un outil qui s'est imposé
non seulement dans le monde académique
mais gagne le monde industriel
(Solvay, Bosch, EDF, IBM, Intel, Western Digital, ...)

editorial

Boosting materials modelling



functional theory" published per year during the past 25 years. Article data taken from Scopus, patent data taken from Patentscope.

Success stories

Energie – thermoélectriques

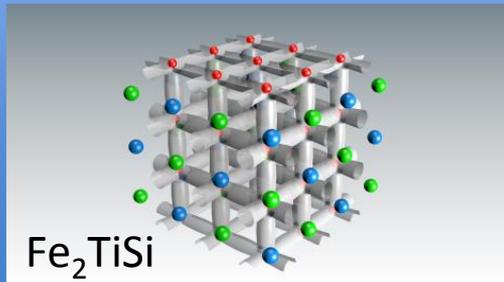
PRL 114, 136601 (2015)

PHYSICAL REVIEW LETTERS

week ending
3 APRIL 2015

Low-Dimensional Transport and Large Thermoelectric Power Factors in Bulk Semiconductors by Band Engineering of Highly Directional Electronic States

Daniel I. Bilc,^{1,2} Geoffroy Hautier,³ David Waroquiers,³ Gian-Marco Rignanesi,³ and Philippe Ghosez¹



Découverte de nouveaux
composés thermoélectriques!

- Projet RW EnergyWall
- Projet FEDER LoCoTED
- Partenaires industriels

L'ECHO SAMEDI 30 MAI 2015

Percée belge dans la conversion de chaleur en électricité

Success stories

Energie – thermoélectriques

PR Electronique – conducteurs transparents



ARTICLE

Received 26 Dec 2012 | Accepted 11 Jul 2013 | Published 13 Aug 2013

DOI: [10.1038/ncomms3292](https://doi.org/10.1038/ncomms3292)

OPEN

Identification and design principles of low hole effective mass *p*-type transparent conducting oxides

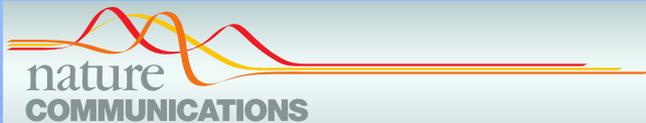
Geoffroy Hautier¹, Anna Miglio¹, Gerbrand Ceder², Gian-Marco Rignanese¹ & Xavier Gonze¹

Success stories

Energie – thermoélectriques

PR Electronique – conducteurs transparents

Optique – électro-chromisme



ARTICLE

Received 2 Dec 2015 | Accepted 14 Jan 2016 | Published 29 Feb 2016

DOI: [10.1038/ncomms10718](https://doi.org/10.1038/ncomms10718)

OPEN

Large elasto-optic effect and reversible electrochromism in multiferroic BiFeO_3

D. Sando^{1,*},†, Yurong Yang^{2,*}, E. Bousquet³, C. Carrétéro¹, V. Garcia¹, S. Fusil¹, D. Dolfi⁴, A. Barthélémy¹, Ph. Ghosez³, L. Bellaiche² & M. Bibes¹

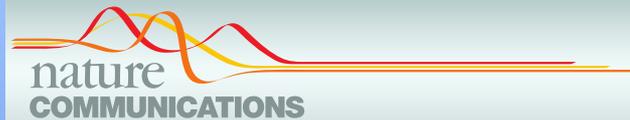
Success stories

Energie – thermoélectriques

PR Electronique – conducteurs transparents

Optique – électro-chromisme

Electronique – multiferroïques



ARTICLE

Received 28 Aug 2014 | Accepted 18 Feb 2015 | Published 25 Mar 2015

DOI: [10.1038/ncomms7677](https://doi.org/10.1038/ncomms7677)

OPEN

Ferromagnetism induced by entangled charge and orbital orderings in ferroelectric titanate perovskites

N.C. Bristowe^{1,2}, J. Varignon¹, D. Fontaine¹, E. Bousquet¹ & Ph. Ghosez¹

Success stories

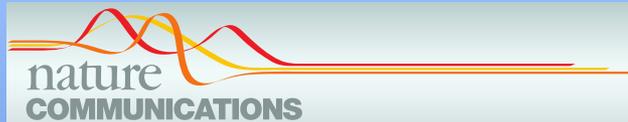
Energie – thermoélectriques

PR Electronique – conducteurs transparents

Optique – électro-chromisme

Electronique – multiferroïques

Stockage de données – matériaux à
changement de phase



ARTICLE

Received 8 Sep 2014 | Accepted 12 May 2015 | Published 24 Jun 2015

DOI: [10.1038/ncomms8467](https://doi.org/10.1038/ncomms8467)

Aging mechanisms in amorphous phase-change materials

Jean Yves Raty¹, Wei Zhang^{2,3}, Jennifer Luckas^{2,4}, Chao Chen², Riccardo Mazzarello^{3,5},
Christophe Bichara⁶ & Matthias Wuttig^{2,5}

Success stories

Energie – thermoélectriques

PR Electronique – conducteurs transparents

Optique – électro-chromisme

Electronique – multiferroïques

Stockage de données – matériaux à

Electronique – fullerènes



ARTICLE

Received 23 Aug 2013 | Accepted 31 Jul 2014 | Published 9 Sep 2014

DOI: [10.1038/ncomms5877](https://doi.org/10.1038/ncomms5877)

OPEN

Unconventional molecule-resolved current rectification in diamondoid-fullerene hybrids

Jason C. Randel^{1,2}, Francis C. Niestemski^{1,3}, Andrés R. Botello-Mendez⁴, Warren Mar⁵, Georges Ndabashimiye^{1,2}, Sorin Melinte⁶, Jeremy E.P. Dahl¹, Robert M.K. Carlson¹, Ekaterina D. Butova⁷, Andrey A. Fokin^{7,8}, Peter R. Schreiner⁷, Jean-Christophe Charlier⁴ & Hari C. Manoharan^{1,3}

Success stories

Energie – thermoélectriques

PR Electronique – conducteurs transparents

Optique – électro-chromisme

Electronique – multiferroïques

Stockage de données – matériaux à

(Electronics Culture)

Quelles sont les évolutions actuelles ?

ARTICLE

Received 23 Aug 2013 | Accepted 31 Jul 2014 | Published 9 Sep 2014

DOI: 10.1038/ncomms5877

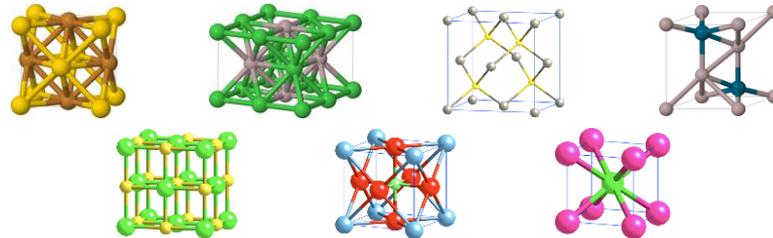
OPEN

Unconventional molecule-resolved current rectification in diamondoid-fullerene hybrids

Jason C. Randel^{1,2}, Francis C. Niestemski^{1,3}, Andrés R. Botello-Mendez⁴, Warren Mar⁵, Georges Ndabashimiye^{1,2}, Sorin Melinte⁶, Jeremy E.P. Dahl¹, Robert M.K. Carlson¹, Ekaterina D. Butova⁷, Andrey A. Fokin^{7,8}, Peter R. Schreiner⁷, Jean-Christophe Charlier⁴ & Hari C. Manoharan^{1,3}

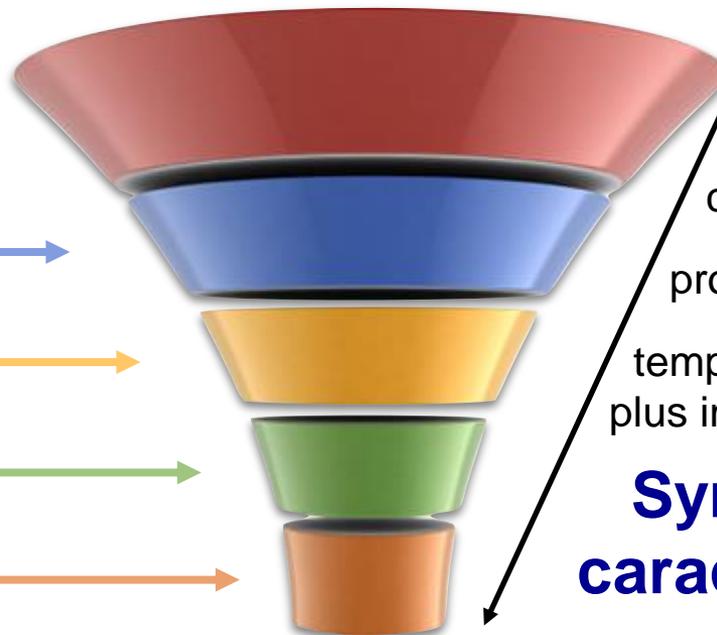
Calculs *ab initio* à “haut-débit”

Partir de :



$O(10^3) \rightarrow O(10^5)$
composés

Calcul *ab initio* HPC



composés moins nombreux
propriétés plus complexes
temps de calcul par composé
plus important

**Synthèse &
caractérisation**

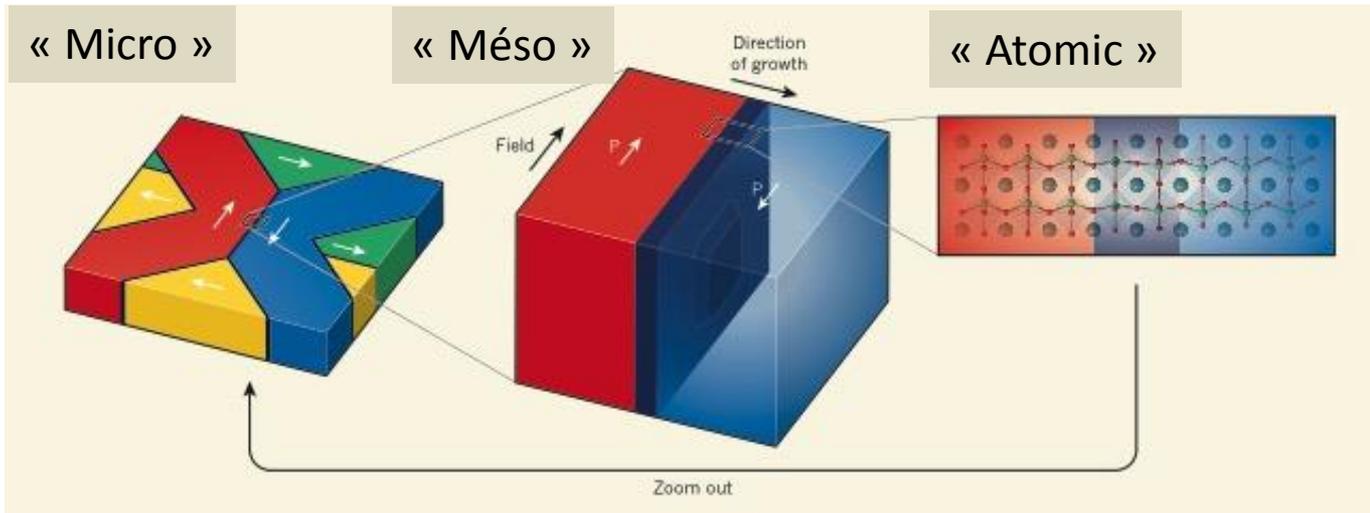


Arriver à :

$O(10^1) \rightarrow O(10^2)$ composés



Calculs multi-échelles



Atomic data

ABINIT

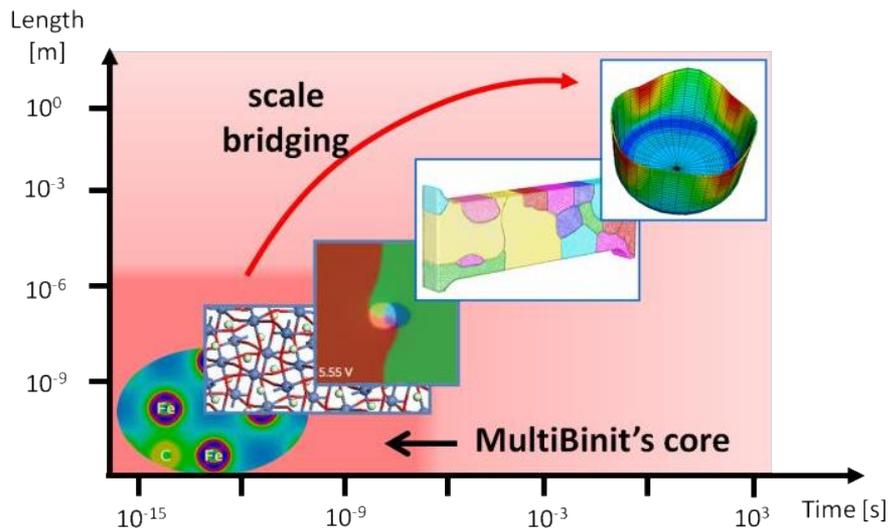
Materials properties

10^2 - 10^3 atomes

SCALE-UP

Materials properties

10^5 - 10^6 atomes



Garder la précision et pouvoir prédictif *ab initio*.



X. Gonze



J.C. Charlier



G.M. Rignanese



G. Hautier

Conclusions



- **Une « success story »** wallonne : un logiciel devenu une référence au niveau international.
- **Une masse critique** en Région Wallonne : 8 académiques permanents et leurs équipes.
- **Des découvertes concrètes** dans le domaine des matériaux (énergie, optique, électronique, ...).
- **Des besoins en personnel** pour maintenir et développer le code et pour l'adapter aux évolutions du hardware.
- **Des besoins considérables en temps calcul** : les plus gros utilisateurs du CECI (Tier1, Tier 2).



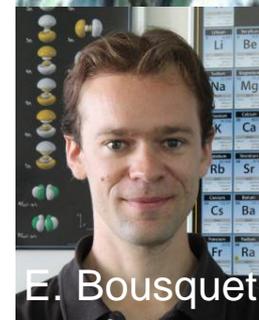
Ph. Ghosez



M. Verstraete



J.-Y. Raty



E. Bousquet