

Abstract

La modélisation et la simulation des propriétés des matériaux sont basées sur le développement de théories et de méthodes de calculs, et vont de la physique ou la chimie quantique pour les phénomènes à l'échelle atomique, aux descriptions continues pour le comportement macroscopique.

La communauté des théoriciens des matériaux a été traditionnellement divisée en sous-communautés largement définies par la longueur et le temps d'intérêt.

L'augmentation rapide des capacités de calcul, en termes de puissance informatique et de nouveaux algorithmes, a permis des développements spectaculaires dans chacun de ces régimes. Ceci entraîne une complexité accrue dans ses diverses formes : géométries plus complexes, de plus longues périodes, etc....

Actuellement, le défi affronté par les théoriciens est de trouver le pont (ou le lien) entre les différentes échelles de longueur et de temps, vers un cadre plus général nommé « Modélisation Multi-échelles ».

A chaque échelle de longueur, il ya des phénomènes émergents qui sont les mieux décrits par le niveau approprié. Le défi est de savoir comment transmettre l'information de manière optimale et appropriée : "se serrer la main", entre les différents régimes.

En termes très généraux, on peut imaginer deux réponses différentes à ce défi. Dans l'approche simultanée, on construit une description universelle (par exemple un hamiltonien), valable à toutes les échelles pertinentes.

Dans l'approche hiérarchique, on procède à la simulation numérique à une échelle et on extrait les grandeurs physiques qui peuvent être utilisées comme paramètres dans les modèles opérant sur les échelles voisines.

Dans nos travaux de recherche, nous avons plutôt opté pour la seconde réponse. Dans cet exposé, je présente le développement et l'application de la modélisation multi échelle pour les thèmes suivants :

i) Croissance des couches atomiques sur un substrat de silice ;

ii) L'organisation supramoléculaire dans les films minces de polymères conducteurs

et les interfaces ;

iii) Interactions moléculaires faibles et leurs applications en biologie.