

N° 319 - juillet/août 2022



BRÈVES DE L'IRAMIS

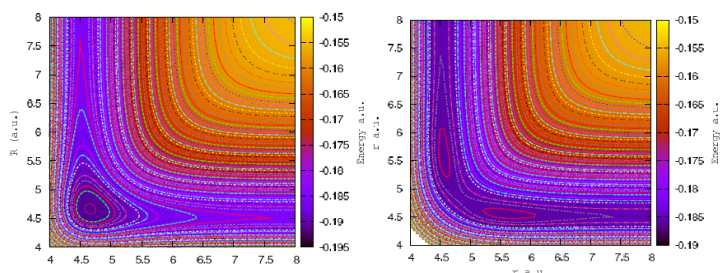


Modéliser des excitons dans des gaz rares

Benoît Gervais : tél : 02.31.45.47.93, benoit.gervais@ganil.fr

La formation d'excitons dans les solides est un paradigme essentiel de la formation de défauts par excitation électronique. Il permet de faire un lien entre le changement d'état électronique et le déplacement atomique précurseur d'un défaut de structure stable. Les excitons sont observés également dans les agrégats d'argon dont on peut faire varier la taille de manière à couvrir l'étendue du dimère au solide. La modélisation des excitons nécessite des calculs de structure électronique au-delà de l'approximation du champ moyen. Dans la thèse de M. Dhiman, nous avons utilisé deux approches de chimie théorique basées sur l'analyse des configurations électroniques des états excités. La première méthode (Diatomics-in-Molecule, DIM) s'appuie sur une représentation des états excités à l'aide d'excitations atomiques élémentaires couplées par des interactions de paires. Elle ne nécessite que les courbes d'énergie potentiel des dimères excités. La seconde s'appuie sur un formalisme trou-particule (HPP) où les

configurations couplées entre elles sont faites d'un trou dans l'une des orbitales atomiques 3p de l'argon et d'une orbitale de Rydberg décrite explicitement, qui s'étend sur tout l'agrégat. Ces deux méthodes existaient dans la littérature, mais seule la méthode DIM avait été utilisée de manière systématique pour étudier des agrégats excités. Avec ces deux méthodes, nous avons étudié des agrégats de 2 à 15 atomes. La figure montre les surfaces d'énergie potentielle obtenues pour l'état triplet de plus basse énergie de Ar_3^* . La méthode DIM prédit un minimum pour une géométrie symétrique alors que la méthode HPP prédit deux minima équivalents pour une géométrie dissymétrique, plus conforme aux interprétations proposées pour la pulvérisation ou la formation de défauts. Par ailleurs, les calculs *ab initio* en fonction d'onde, réalisés pour obtenir une référence, sont instables. Ils révèlent la complexité de l'interaction mais ne permettent pas de trancher à l'heure actuelle entre les deux résultats.



Surfaces d'énergie potentielle du trimère Ar_3^* , obtenues par la méthode DIM (à gauche) et HPP (à droite). On voit clairement la différence au niveau du minimum d'énergie qui se scinde en deux dans le cas de la méthode HPP.

Brèves des labos



Les chercheurs du LIDYL parmi les finalistes au prix Gordon Bell

Le prix Gordon Bell, aussi dénommé "Prix Nobel du supercalcul", récompense les réalisations exceptionnelles dans les applications de calcul haute performance. L'objectif principal est de suivre les progrès du calcul parallèle, en reconnaissant et récompensant l'innovation dans l'utilisation du calcul haute performance, pour les applications en science, ingénierie et pour l'analyse de données à grande échelle. Créé en 1987, ce prix prestigieux est financé par Gordon Bell, pionnier du calcul parallèle haute performance. Il est décerné chaque année par l'Association for Computing Machinery - ACM.

L'équipe d'Henri Vincenti du LIDYL-PHI, en collaboration avec une équipe du Lawrence Berkeley National Lab, est finaliste du prix Gordon Bell 2022, pour leurs recherches autour du code 3D d'interactions laser-matière WarpX, dans le cadre d'un partenariat avec le grand équipement national de calcul intensif - GENCI, le RIKEN, Center for Computational Science (Japon), et les sociétés ATOS et Arm. Le prix sera décerné en novembre 2022 lors de la prochaine conférence SuperComputing, à Dallas (USA).

Un grand bravo à Henri Vincenti et Luca Fedeli !

https://iramis-i.cea.fr/Phocea/Vie_des_labos/News/index.php?id_news=8551

