

Séminaire PLUM, mercredi 15 janvier 2025, 10h30 - Grenoble.



**Dr Gilles FRAPPER**

Groupe Chimie quantique Appliquée, MediaCat E4,  
IC2MP – Poitiers U., CNRS

<https://orcid.org/0000-0001-5177-6691>

[gilles.frapper@univ-poitiers.fr](mailto:gilles.frapper@univ-poitiers.fr)

## BIOGRAPHIE

Gilles Frapper est né à Saint-Cado, dans le sud de la Bretagne. Il a étudié la chimie à l'université de Rennes (doctorat en chimie quantique appliquée, 1996. Dir. Pr. Jean-Yves Saillard et Dr. Jean-François Halet). Depuis 1997, il est à l'Université de Poitiers, après avoir occupé des postes de recherche au CNRC à Ottawa (groupe du Dr. John Tse) et à Georgetown U. à Washington D.C. (Pr. Miklos Kertesz). Il a enseigné l'introduction à la chimie et il apprécie (encore) d'enseigner la chimie théorique et les sciences des matériaux. Ses recherches portent principalement sur la compréhension des arrangements atomiques dans les composés moléculaires et à l'état solide, en relation avec leurs propriétés. Il s'est spécialisé dans le domaine de la découverte *in silico* des matériaux, en prédisant des systèmes bidimensionnels et les matériaux sous pression. Aujourd'hui, il combine des algorithmes évolutionnaires (génétiques), des générateurs aléatoires, des potentiels interatomiques obtenus par apprentissage automatique (MLIP) et des calculs DFT pour concevoir de nouveaux matériaux dotés de propriétés et d'applications spécifiques.

**Titre :**

**Quand Darwin rencontre Mendeleïev : prédire les matériaux à partir d'algorithmes évolutionnaires et de calculs de principes premiers.** *Illustrations:* systems Pb-N et Li-C-N sous pression (45 min., en langue française ; diaporama en langue anglaise).

par Dr Gilles FRAPPER

<https://orcid.org/0000-0001-5177-6691>

**Résumé :**

L'utilisation de la simulation numérique pour déterminer la structure cristalline d'un composé, sur la base de la seule connaissance de sa composition chimique, est un défi majeur dans la science des matériaux. La tâche est loin d'être triviale : il s'agit d'identifier l'arrangement structural de plus faible énergie parmi des millions de structures possibles. Pour illustrer ce défi, l'arrangement de vingt atomes dans une boîte - un réseau répétitif de forme et de volume variables - peut a priori générer plus de  $10^{21}$  structures possibles qui se situent sur la surface d'énergie potentielle (PES). S'il fallait 1 heure de calcul pour déterminer numériquement l'énergie associée à chaque structure optimisée, le temps de calcul nécessaire dépasserait l'âge de l'univers... Le problème est donc : comment accéder au puits d'énergie le plus bas (minimum global sur la PES) tout en monopolisant un minimum de ressources informatiques ?

Cet exposé traitera d'une méthode d'auto-apprentissage pour l'exploration de la PES d'un composé cristallin, un algorithme évolutionnaire (génétique) combiné à des calculs DFT. Je décrirai brièvement la problématique CSP, puis la base conceptuelle de cet algorithme génétique CSP, qui repose sur les concepts de la théorie de l'évolution darwinienne. J'illustrerai ensuite son utilisation en présentant quelques résultats de travaux récents menés dans mon groupe Chimie Quantique Appliquée de l'IC2MP (au choix) : l'exploration du diagramme de phase binaire plomb-azote sous pression (0-100 GPa), l'émergence de nouvelles compositions dans le système ternaire Li-C-N à 50 et 100 GPa, les hydrures ABH<sub>3</sub> perovskites sous pression (A, groupe I ; B groupe II) qui parfois n'ont rien de « perovskites »..., et l'étude de la stabilité de phases sélectionnées aux conditions ambiantes ; les propriétés de liaison et électroniques des composés *in silico* à l'aide d'outils de chimie théorique de base et de pointe (Lewis, VSEPR, ELF, COHP, COBI, ...);