



Simulation de matériaux ioniques pour énergie

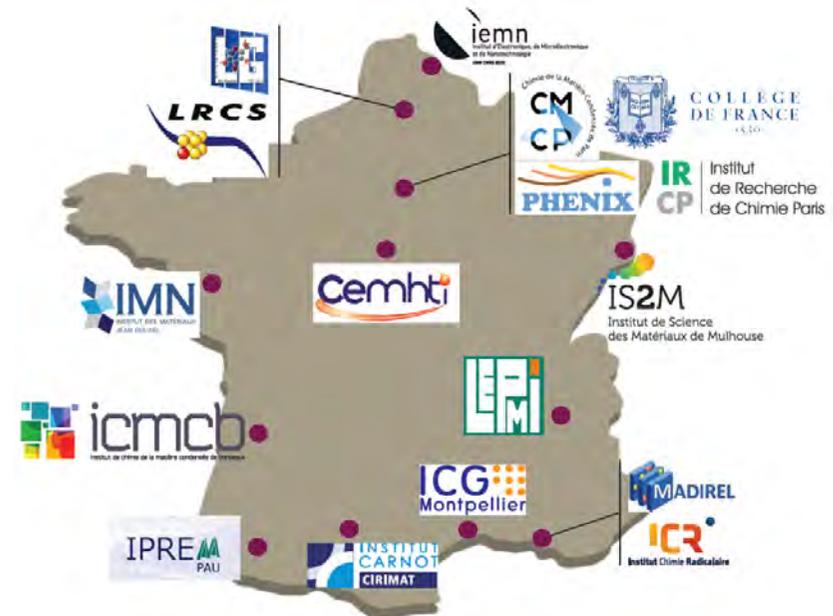


M. Salanne

Laboratoire PHENIX, Université Pierre et Marie Curie/CNRS
Maison de la Simulation, CEA/CNRS/INRIA/Université Paris Sud

Laboratoire PHENIX

- UMR UPMC / CNRS
- Environ 60 chercheurs (dir.: P. Levitz), 3 équipes:
 - Modélisation et expériences multi-échelles
 - Electrochimie et liquides ioniques
 - Colloides inorganiques
- Membre de la fédération matériaux de l'UPMC
- Membre du Réseau National sur le Stockage Electrochimique de l'Energie (dir.: J.M. Tarascon)



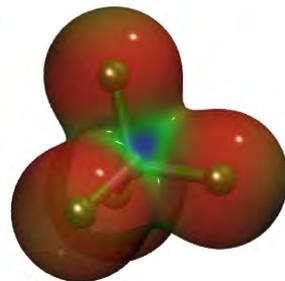
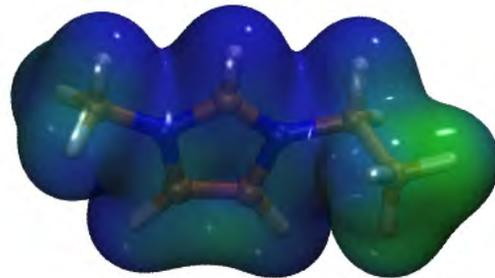
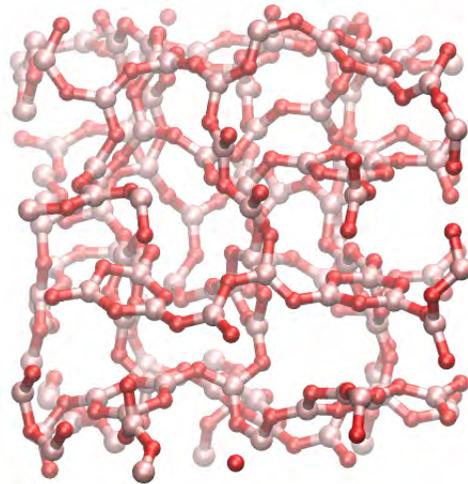
Maison de la Simulation



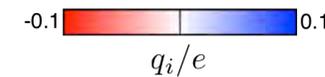
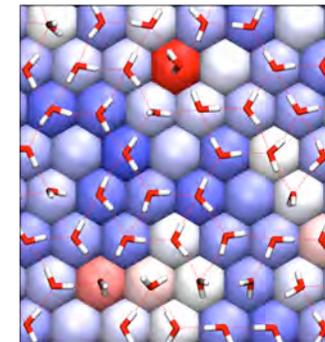
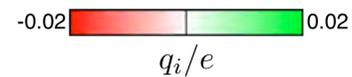
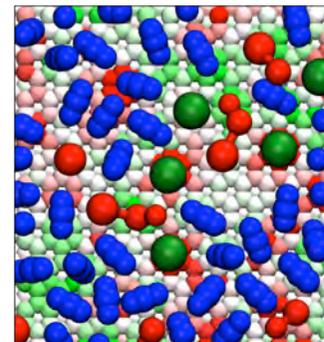
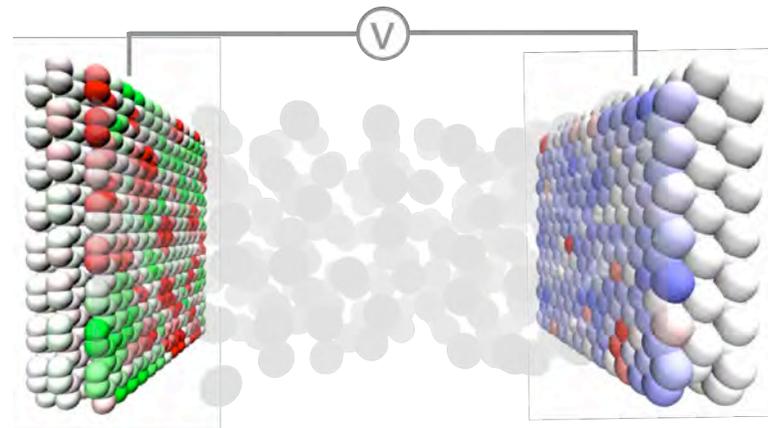
- Laboratoire CNRS / CEA / INRIA / U. Paris-Sud / U. Versailles
- Localisé sur le plateau de Saclay
- Objectif: relever les grands défis du calcul intensif
- Chercheurs permanents de thématiques transverses (mathématiques appliquées, informatique, algorithmique)
- Chercheurs accueillis sur projet (chaires d'excellence)

Design de matériaux pour le stockage de l'énergie
à l'aide du calcul haute performance (2014-2019)

Méthodologie

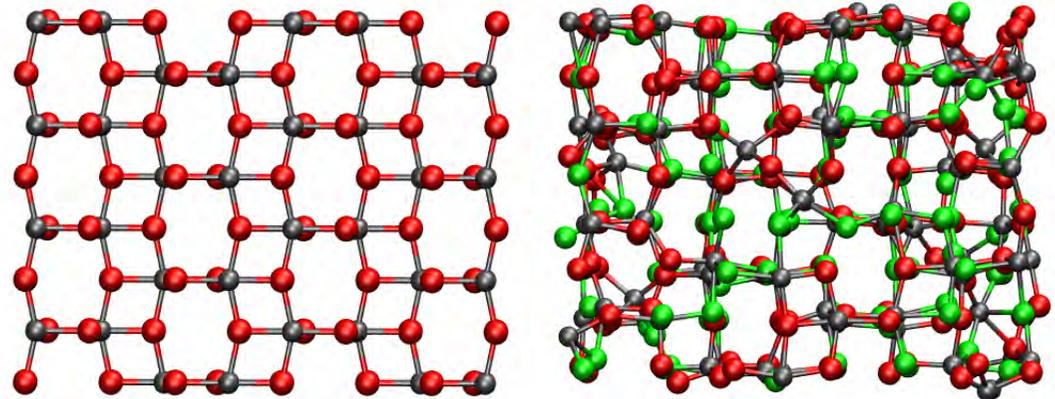
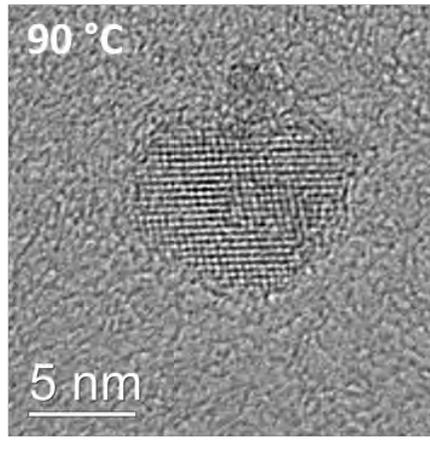


- DFT / dynamique moléculaire
- Simulation d'électrodes à potentiel constant



Anatase fluorée

Nanoparticules de composition $\text{Ti}_{1-x-y}\square_{x+y}\text{O}_{2-4(x+y)}\text{F}_{4x}(\text{OH})_{4y}$
(synthèse: D. Dambournet)



Taux de lacunes > à 20 % -- structure très désordonnée

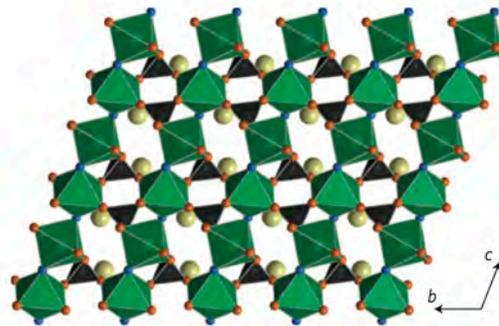
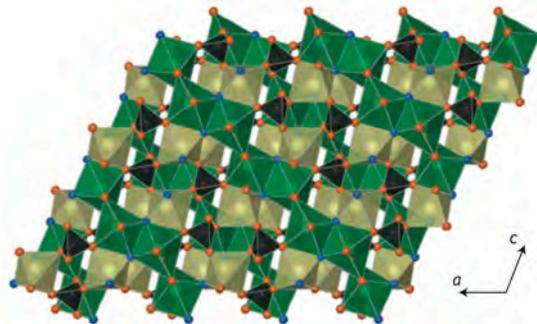
Essais prometteurs en batteries Li-ion

Brevet UPMC / Hydroquébec

Diffusion du Li^+ dans les batteries



LiMSO_4F :
Matériaux à haut
potentiel (J.M. Tarascon)



240 ps

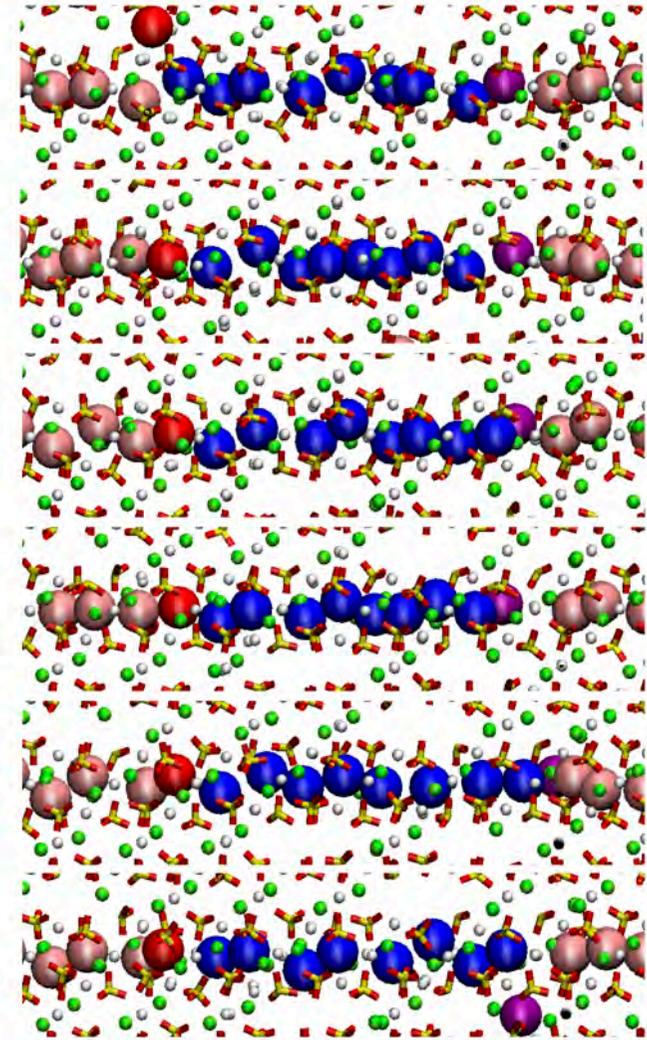
250 ps

260 ps

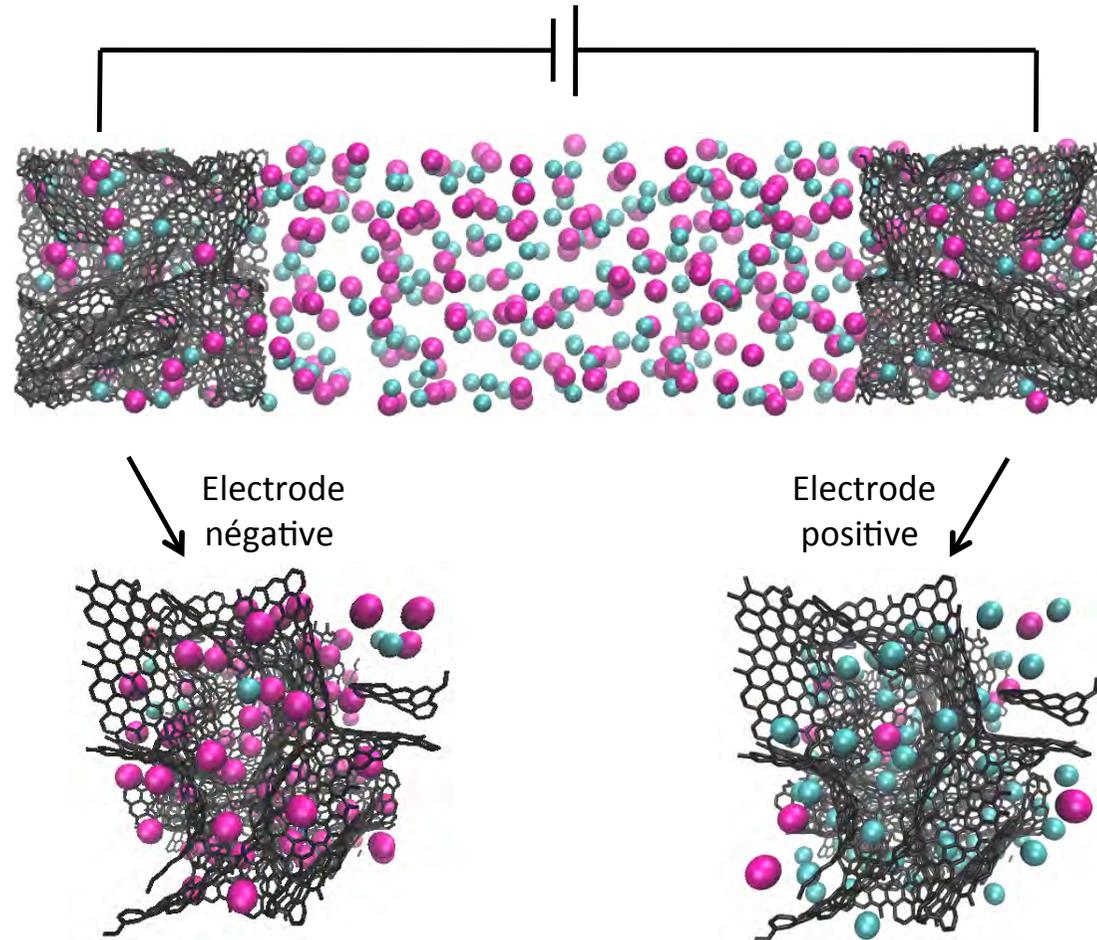
270 ps

280 ps

290 ps



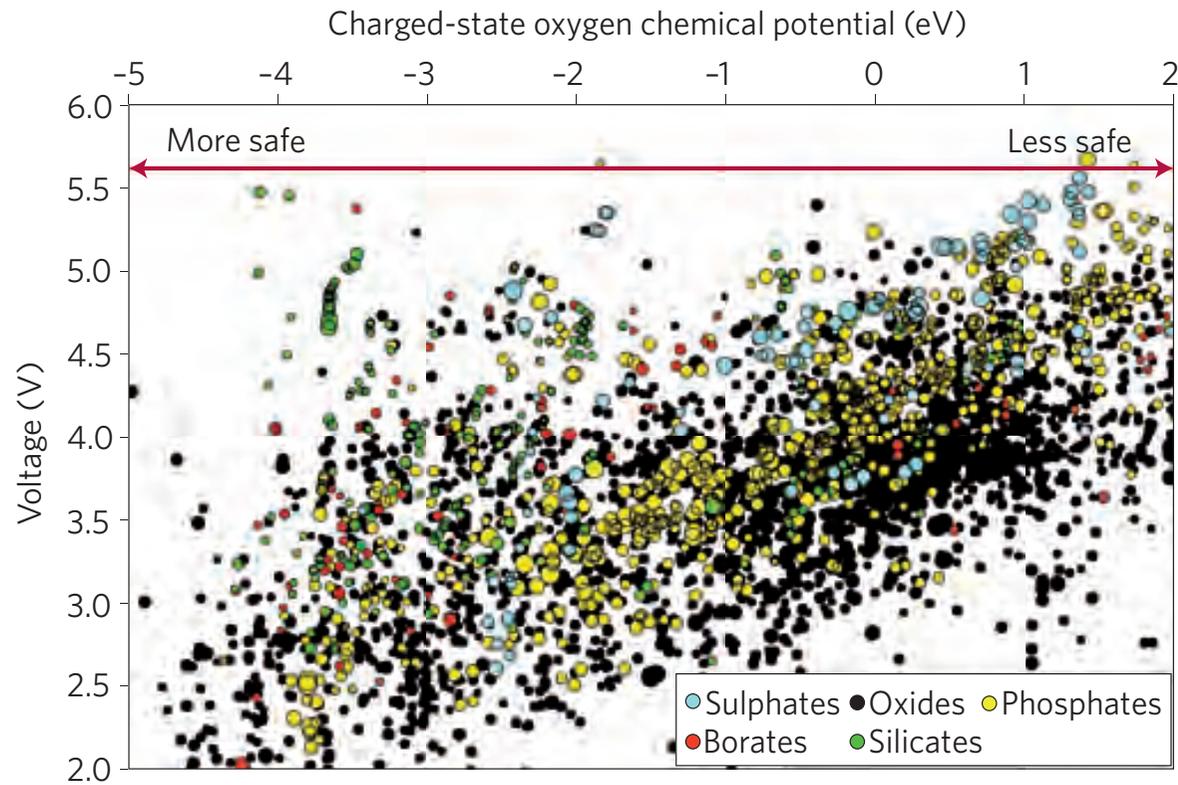
Supercondensateurs



Collaboration avec P. Simon (CIRIMAT, Toulouse)

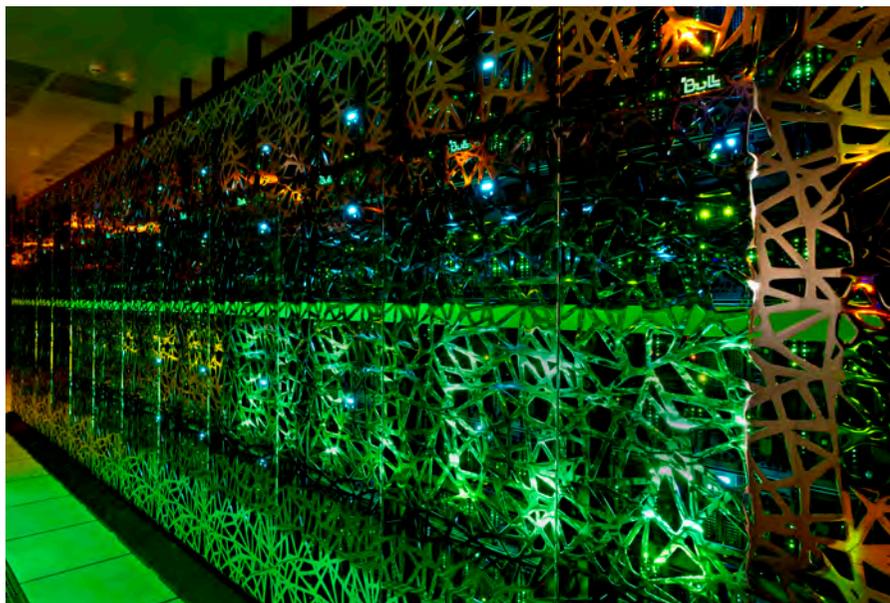
Merlet *et al.*, *Nature Materials*, 2012; *Nature Communications*, 2013

La piste de développement la plus prometteuse et pourquoi?



“Génome des matériaux”

Plateaux scientifiques dont on doit se doter pour réussir



Supercalculateur
Curie

- Massivement parallèle, grands challenges...
... mais aussi besoin de “task farming”
- Modélisation: plateformes permettant le passage de paramètres entre les équipes

Partenariats incontournables



- Partenariat centres de calcul / laboratoire de recherche

Mise en place d'équipes regroupant des ingénieurs et des chercheurs pour développer des codes efficaces / massivement parallèles



- Comment produire des bases de données pour l'industrie?

