



Revue
scientifique
et technique
de la Direction
des applications
militaires

Numéro **46**
Novembre 2014

La simulation *ab initio*

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

cea

sommaire

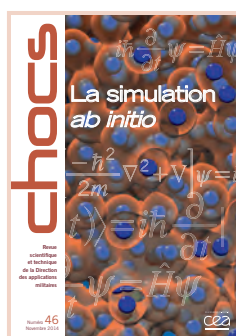
La simulation *ab initio*

1	Présentation du thème <i>J. Clérouin</i>	2
2	Vers une compréhension microscopique de la matière <i>F. Jollet</i>	4
3	Fusion de matériaux à haute pression <i>J. Bouchet, F. Bottin, G. Robert, V. Recoules, S. Bernard</i>	12
4	Simulation de systèmes moléculaires complexes <i>N. Pineau, B. Siberchicot, M. Torrent, G. Robert, J. Aupiais, C. den Auwer</i>	19
5	Croissance des matériaux : remonter les échelles <i>N. Richard, P. Paillet, A. Hémerlyck, A. Estève, M. Djafari-Rouhani, G. Landa, P. Blaise</i>	26
6	Modélisation des propriétés magnétiques des matériaux <i>P. Thibaudeau</i>	37
7	Description microscopique des systèmes nucléaires <i>G. Blanchon, N. Dubray, J.-P. Ébran, S. Hilaire, B. Morillon, S. Péru, N. Pillet, J. Carbonell, R. Lazauskas</i>	45
8	Étude <i>ab initio</i> des oxydes d'actinides : volume et surface <i>F. Bottin, G. Geneste, B. Dorado, G. Jomard</i>	56
9	Au-delà de la théorie de la fonctionnelle de la densité <i>B. Amadon</i>	63
10	Équation d'état d'un plasma : avec ou sans orbitales ? <i>J.-F. Danel, L. Kazandjian</i>	72
11	Calculs <i>ab initio</i> en physique du solide : les défis des supercalculateurs <i>M. Torrent, L. Colombet, A. Levitt</i>	80
	Glossaire	87

Numéro **46**
Novembre 2014

En couverture :

Le calcul *ab initio* en structure électronique, ou comment résoudre *au vol* au cours du temps un système complexe composé de noyaux (en bleu) et d'une densité électronique (en orange). Ici, du tungstène à 20 g.cm⁻³ et 1 000 000 K.
(crédit : J. Clérouin / CEA – DAM)



Revue
scientifique
et technique
de la Direction
des applications
militaires
du CEA

contents

Ab initio simulation

1	Presentation of the topic <i>J. Clérouin</i>	2
2	Towards a microscopic understanding of matter <i>F. Jollet</i>	4
3	Melting of materials under high pressure <i>J. Bouchet, F. Bottin, G. Robert, V. Recoules, S. Bernard</i>	12
4	Simulation of complex molecular systems <i>N. Pineau, B. Siberchicot, M. Torrent, G. Robert, J. Aupiais, C. den Auwer</i>	19
5	Growth of materials: climbing the scales <i>N. Richard, P. Paillet, A. Hémerlyck, A. Estève, M. Djafari-Rouhani, G. Landa, P. Blaise</i>	26
6	Modelling magnetic properties of materials <i>P. Thibaudeau</i>	37
7	Microscopic description of nuclear systems <i>G. Blanchon, N. Dubray, J.-P. Ébran, S. Hilaire, B. Morillon, S. Péru, N. Pillet, J. Carbonell, R. Lazauskas</i>	45
8	<i>Ab initio</i> study of actinide oxides: volume and surface <i>F. Bottin, G. Geneste, B. Dorado, G. Jomard</i>	56
9	Beyond Density Functional Theory: Strong correlations <i>B. Amadon</i>	63
10	Equation of state of a plasma: Orbital-free or quantum approach? <i>J.-F. Danel, L. Kazandjian</i>	72
11	<i>Ab initio</i> calculations in solid state physics: challenges of supercomputers <i>M. Torrent, L. Colombet, A. Levitt</i>	80
	Glossary	87

Numéro **46**
Novembre 2014

**Directeur
de la publication :**
Thierry Massard

**Comité
scientifique :**
Daniel Bouche
Pierre Bruguière
Jacques Cagnoux
Catherine Cherfils
Jean Clérouin
Jean-François Clouet
Gilles Damamme
Patrick David
Philippe Duvignac
Francis Hardouin
Denis Juraszek

Christophe Leloup
Stéphane Loubière
Daniel Malys
Christophe Moulin
Bruno Scheurer
Philippe Simonetti

Rédacteur en chef :
Michel Boivineau

**Création
et réalisation :**
Calathea
13 rue Paul Bert
75011 Paris

Impression :
ETC-INN

**Secrétariat
Diffusion
Abonnement :**
Régis Vizet

chocs
CEA – DAM
Institut supérieur des études
nucléaires de défense
(ISENDé)
Bruyères-le-Châtel
F-91297 Arpajon Cedex
Tél. : 33 (0)1 69 26 76 98
Fax : 33 (0)1 69 26 70 80
E-mail : chocs@cea.fr
ISSN 1157-741X