Département Mécanique et Verres
Institut de Physique de Rennes – Université de Rennes, CNRS

Sujet de stage / Projet de Master 2

Laboratoire : Département Mécanique et Verres (Direct. Yann Gueguen), Institut de Physique de Rennes, UR, CNRS, UMR 6251
Adresse : Université de Rennes, campus de Beaulieu, 263 av. Général Leclerc, 35042 Rennes cedex
Directeur du laboratoire : Jean-Luc Autran

Responsable(s) du projet : Khalis Attou, Doctorant UR / Maxime Vassaux, chargé de recherche, CNRS
Téléphone : +33 (0) 2 23 23 64 16
e-mail : khalis.attou@univ-rennes.fr / maxime.vassaux@univ-rennes.fr

Quand le verre boit de l'eau : Construction d'un potentiel interatomique à base de machine learning pour la mécanique de verres nanostructurés/hydratés

Contexte scientifique :

Les matériaux vitreux, notamment les verres à base de silice, occupent une place essentielle dans notre quotidien et dans de nombreux secteurs technologiques : matériaux de construction, vitrages, fibres optiques, contenants alimentaires ou encore composants électroniques. Leur transparence, leur stabilité chimique et leurs propriétés mécaniques en font des matériaux incontournables, aussi bien pour des applications courantes que pour des technologies de pointe. Pourtant, derrière ces propriétés macroscopiques se cache une structure atomique désordonnée et complexe, dont la compréhension demeure un enjeu scientifique important.

La simulation numérique permet d'étudier les matériaux à l'échelle atomique et de relier leur structure à leurs propriétés.La dynamique moléculaire permet notamment de suivre l'évolution des atomes au cours du temps grâce à des potentiels interatomiques, qui décrivent leurs interactions et calculent les forces qui s'exercent sur eux.

Objectifs et méthodologie

Le développement de potentiels interatomiques repose traditionnellement sur des formes analytiques empiriques, fondées sur des interactions à deux ou trois corps [1][2][3]. Bien que ces approches présentent un coût de calcul relativement faible, elles peuvent peiner à décrire avec précision la diversité des environnements atomiques rencontrés dans les matériaux vitreux, notamment en présence d'eau et d'espèces chimiques spécifiques.

Les approches fondées sur l'apprentissage automatique (Machine Learning Interatomic Potentials, MLIP) constituent aujourd'hui une alternative prometteuse. En s'appuyant sur des architectures telles que DeePMD[4] ou GAP[5] (Gaussian Approximation Potentials), elles permettent d'apprendre une représentation de la surface d'énergie potentielle à partir de données de référence issues de calculs de chimie quantique, notamment des énergies et des forces atomiques obtenues par des méthodes ab initio. Ces potentiels visent ainsi à combiner une précision proche de celle des calculs de référence avec un coût numérique compatible avec des simulations à plus grande échelle.

L'objectif de ce stage sera de développer et de valider un potentiel interatomique de type MLIP dédié à l'étude de matériaux vitreux hydratés. Dans un premier temps, différentes simulations de dynamique moléculaire ab initio seront réalisées afin de constituer une base de données représentative d'un large éventail de configurations atomiques : liquide fondu, verre refroidi, états intermédiaires et configurations perturbées. Les énergies, les forces atomiques et, selon les besoins, les contraintes calculées serviront ensuite de données de référence pour entraîner un potentiel d'apprentissage automatique.

Une fois entraîné et validé, ce potentiel sera utilisé pour réaliser des simulations de dynamique moléculaire à plus grande échelle et sur des durées plus longues que celles accessibles directement par les méthodes ab initio. Ces simulations permettront d'étudier et de caractériser la structure et les propriétés des verres hydratés, ainsi que l'influence de l'eau sur leur organisation atomique.

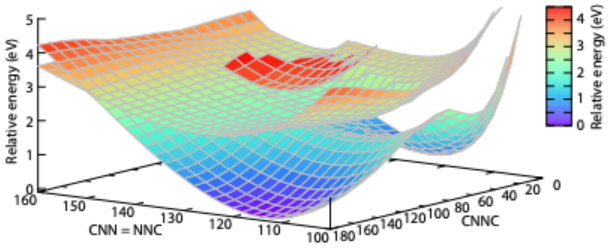
Ce travail impliquera l'utilisation de ressources de calcul intensif (High-Performance Computing, HPC), depuis la génération des données de référence jusqu'à l'entraînement et à l'exploitation du potentiel interatomique.

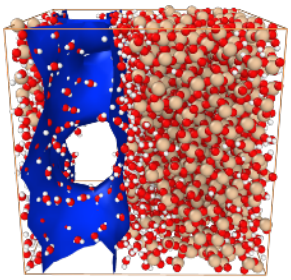
Profil recherché

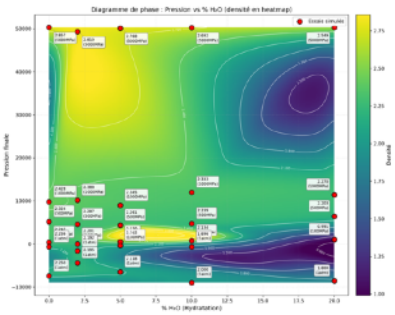
Ce stage s'adresse à un·e étudiant·e manifestant un intérêt marqué pour la simulation numérique et la physique des matériaux. De solides bases en physique de la matière condensée et en physique quantique sont requises. Des connaissances en simulation atomistique, en dynamique moléculaire ou en machine learning constitueront un plus, sans être nécessairement indispensables selon le niveau de formation.

Environnement de travail

Le stage se déroulera au sein d'un petit groupe de recherche en physique et en mécanique numérique à l'Institut de Physique de Rennes. L'étudiant·e intégré·e aux activités scientifiques du groupe et pourra assister à différents séminaires, réunions et événements scientifiques organisés au sein du laboratoire.







Aleotti, F. et al., J. Chem. Theory Comput., 15(12), 6813–6823 (2019).
DOI : 10.1021/acs.jctc.9b00561 .

Mots clés : DFT, machine learning, dynamique moléculaire, simulation numérique, verres, matériaux amorphes, Python.

[1] : Bertani, M., Menziani, M. C. et Pedone, A., Phys. Rev. Mater., 5, 045602 (2021).
[2] : Shih, Y.-T., Sundararaman, S., Ispas, S. et Huang, L., J. Non-Cryst. Solids, 565, 120853 (2021).
[3] : Van Duin, A. C. T. et al., J. Phys. Chem. A, 105, 9396–9409 (2001).
[4] : Wang et al., Comput. Phys. Commun. 228 (2018), 178–184. https://doi.org/10.1016/j.cpc.2018.03.016
[5] : Klawohn et al., J. Chem. Phys. 159(17), 174108 (2023). https://doi.org/10.1063/5.016604

Département Mécanique et Verres
Institut de Physique de Rennes – Université de Rennes, CNRS

Master's Internship / Master's Project (M2)

Laboratory : Mechanics and Glasses Department (Direct. Yann Gueguen), Institut de Physique de Rennes, Université de Rennes, CNRS, UMR 6251
Location : Université de Rennes, campus de Beaulieu, 263 av. Général Leclerc, 35042 Rennes cedex
Laboratory Director : Jean-Luc Autran

Project Supervisors : Khalis Attou, PhD Candidate UR / Maxime Vassaux, chargé de recherche, CNRS
Telephone : +33 (0) 2 23 23 64 16
e-mail : khalis.attou@univ-rennes.fr / maxime.vassaux@univ-rennes.fr

When Glass Drinks Water: Developing a Machine-Learning-Based Interatomic Potential for the Mechanics of Nanostructured/Hydrated Glasses

Scientific Background

Glassy materials, particularly silica-based glasses, play an essential role in our daily lives and across a wide range of technological sectors, including construction materials, windows, optical fibers, food packaging, and electronic components. Their transparency, chemical stability, and mechanical properties make them indispensable for both everyday applications and cutting-edge technologies. However, behind these macroscopic properties lies a complex, disordered atomic structure, the understanding of which remains an important scientific challenge.

Numerical simulations make it possible to investigate materials at the atomic scale and establish links between their structure and properties. Molecular dynamics simulations, in particular, track the evolution of atoms over time using interatomic potentials, which describe atomic interactions and calculate the forces acting on each atom.

Objectives and Methodology

The development of interatomic potentials has traditionally relied on empirical analytical forms based on two-body or three-body interactions[1][2][3]. Although these approaches are relatively inexpensive computationally, they can struggle to accurately describe the diversity of atomic environments found in glassy materials, particularly in the presence of water and specific chemical species.

Machine Learning Interatomic Potentials (MLIPs) have emerged as a promising alternative. Using architectures such as DeePMD[4] and GAP[5] (Gaussian Approximation Potentials), these approaches learn a representation of the potential energy surface from reference data obtained through quantum chemistry calculations, including energies and atomic forces computed using ab initio methods. The aim is to combine accuracy close to that of the reference calculations with a computational cost compatible with larger-scale simulations.

The objective of this internship is to develop and validate a machine-learning interatomic potential dedicated to the study of hydrated glassy materials. First, a series of ab initio molecular dynamics simulations will be performed to build a dataset representative of a wide range of atomic configurations, including molten liquids, quenched glasses, intermediate states, and perturbed configurations. The calculated energies, atomic forces and, where appropriate, stresses will then serve as reference data for training the machine-learning potential.

Once trained and validated, the potential will be used to perform molecular dynamics simulations on larger systems and over longer timescales than those directly accessible through ab initio methods. These simulations will make it possible to investigate and characterize the structure and properties of hydrated glasses, as well as the influence of water on their atomic organization.

This project will involve the use of high-performance computing (HPC) resources, from the generation of reference data to the training and deployment of the interatomic potential.

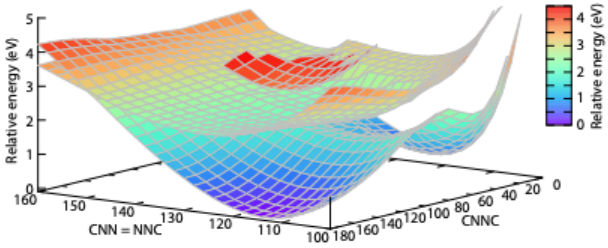
Département Mécanique et Verres
Institut de Physique de Rennes – Université de Rennes, CNRS

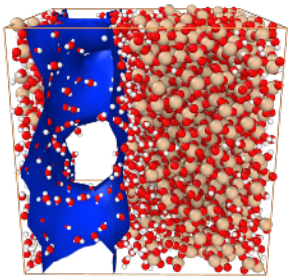
Candidate Profile

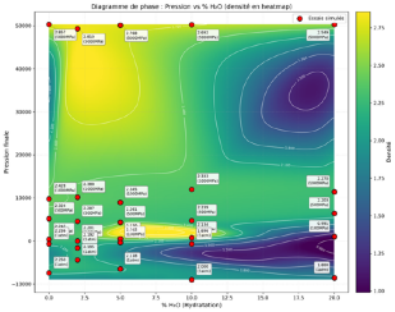
This internship is intended for a student with a strong interest in numerical simulation and materials physics. A solid background in condensed matter physics and quantum physics is required. Knowledge of atomistic simulation, molecular dynamics, or machine learning would be an advantage, although it is not necessarily essential, depending on the student's academic background and level of training.

Working Environment

The internship will take place within a small research group specializing in physics and computational mechanics at the Institut de Physique de Rennes. The student will become involved in the group's scientific activities and will have the opportunity to attend seminars, research meetings, and other scientific events organized within the laboratory.







Aleotti, F. et al., J. Chem. Theory Comput., 15(12), 6813–6823 (2019).
DOI : 10.1021/acs.jctc.9b00561 .

Keywords : Density Functional Theory (DFT), machine learning, molecular dynamics, numerical simulation, glass, amorphous materials, Python.

[1] : Bertani, M., Menziani, M. C. et Pedone, A., Phys. Rev. Mater., 5, 045602 (2021).
[2] : Shih, Y.-T., Sundararaman, S., Ispas, S. et Huang, L., J. Non-Cryst. Solids, 565, 120853 (2021).
[3] : Van Duin, A. C. T. et al., J. Phys. Chem. A, 105, 9396–9409 (2001).
[4] : Wang et al., Comput. Phys. Commun. 228 (2018), 178–184. https://doi.org/10.1016/j.cpc.2018.03.016
[5] : Klawohn et al., J. Chem. Phys. 159(17), 174108 (2023). https://doi.org/10.1063/5.016604