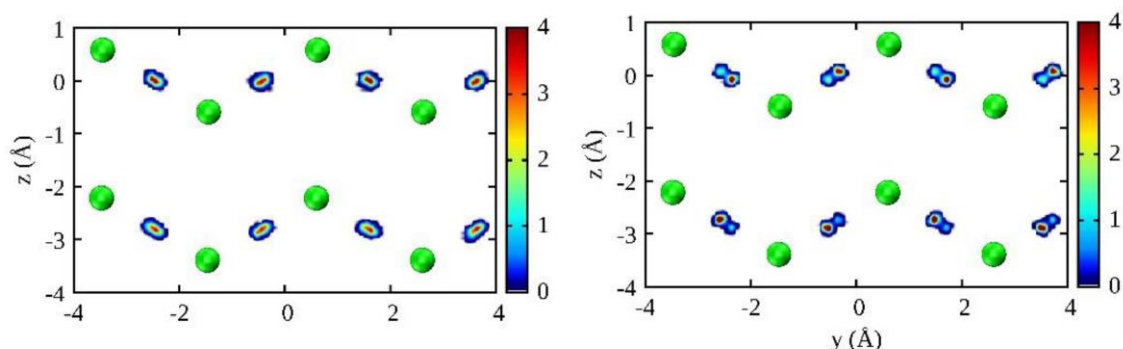


H.1.3 HICHEM DAMMAK

Mon activité de recherche principale au laboratoire SPMS porte sur le développement de méthodes, pour la simulation par la technique de la dynamique moléculaire, afin d'y inclure les effets quantiques observés à basse température et pour les atomes légers. Un thermostat quantique universel (QTB-MD) a été mis au point en 2009 dans le cadre de l'approximation harmonique qui permet d'économiser au moins deux ordres de grandeur de temps de calcul par rapport à la méthode PIMD bien connue basée sur le formalisme de l'intégrale du chemin de Feynmann. La méthode QTB-MD a été ensuite combinée, en 2015, avec la méthode PIMD pour la rendre applicable aux systèmes hautement anharmoniques. En collaboration avec une équipe du CEA/DAM, nous avons implanté les deux méthodes, QTB-MD et QTB-PIMD, dans le code de calcul de structure de bande ABINIT. Ces méthodes sont également implantées depuis 2018 dans le code CP2K par un ancien doctorant du laboratoire SPMS. Mes activités de recherche ont porté également sur l'origine de la piézoélectricité géante dans les monocristaux à base de pérovskites complexes (1994-2012) en collaboration avec des industriels comme Thales pour des applications SONAR et sondes échographique. J'avais démarré ma carrière de chercheur après Centrale Paris en étudiant les transitions de phases induites par irradiation aux ions lourds rapides dans les métaux (1991-1994) au laboratoire LSI du CEA.

Mes enseignements principaux sont dans : Physique Quantique et Statistique (1A), Physique des Ondes (1A), Physique de la matière (2A), Modélisation et Simulation Numérique (3A)



Distributions de la position des atomes H ou D à 100K dans les chaînes en zig-zag d'un cristal HF (gauche) et DF (droite), obtenues par la méthode QTB-PIMD. Les positions moyennes des atomes de F sont représentées par les sphères vertes. La figure montre la symétrisation des liaisons hydrogène dans HF et le saut de D dans DF par effet tunnel. *J. Chem Theory Comput.*, 12(3), 1351-1359, 2016