

Stage Néo Quanticiens 2022

Objectifs et mini projets

Nana Engo
serge.nana-engu@facsciences-uy1.cm

Department of Physics
Faculty of Science
University of Yaounde I

https://github.com/NanaEngo/UY1_NeoQ2022

30 juin 2022



Compétences d'un Master

- Master = Cadre supérieur et donc avoir des compétences
 - Scientifiques
 - Managériales
 - Entrepreneuriales
- Etre capable de
 - 1 Maîtriser les concepts scientifiques de son domaine de recherche
 - 2 Participer à l'élaboration d'un projet de recherche (formulation d'hypothèses de travail, élaboration de protocoles et préconisation des choix, création de cahiers des charges fonctionnel, planification)
 - 3 Simuler un modèle et analyser les résultats
 - 4 Rédiger des rapports scientifiques
 - 5 Communiquer oralement en français et en anglais sur un sujet scientifique
 - 6 Organiser, piloter et valoriser des réunions



Esprit Ubuntu

Je suis parce que nous sommes

- 1 Rester courtois et polis en toute circonstance
- 2 Être physiquement présentable
- 3 Être disponible pour les autres
- 4 Savoir prendre des initiatives pour sois-même et pour les autres
- 5 Respecter les engagements pris



Modules des acquis à travers les mini-projets

Linux et LaTeX

Linux

- Installation d'une distribution
- Commandes de bases
- Installation des packages et MAJ
- Organisation des répertoires
- Lien symboliques vers répertoires
- Utilisation de plusieurs partitions du DD

LaTeX

- Installation de TeXLive et choix des collections
- Processus de MAJ
- Création des **newcommand**
- Rédaction d'un bon rapport
- Rédaction d'un exposé avec Beamer
- Insertion des images

Modules des acquis à travers les mini-projets

Python et Travail collaboratif

Python

- Installation d'une distribution
- Commandes de bases de numpy, scipy, panda
- Utilisation de base matplotlib
- Atomic Simulation Environment (ASE)
- DFT et TDDFT avec python
- Jarvis-tools

Travail collaboratif

- LaTeX sur [overleaf](#)
- Google [Colab](#) et [Kaggle](#)
- [Github](#)
- Google Chat & Space
- Google Drive
- [Google Agenda](#)

Mini-projets

Concept

- Les quatre stagiaires travaillent toutes ensemble sur les quatre projets et chacune d'elle est **project-leader** d'un projet
- L'ensemble des Néo Quanticiens participe au coaching des stagiaires, mais le mentor principal de chaque stagiaire rend compte de l'évolution de sa stagiaire
- Les CR des travaux se feront toutes les 2-3 semaines sous forme d'exposé
- L'organisation des séances des CR est de la responsabilité des mentors et elle se fera à tour de rôle
- La participation de l'ensemble de l'équipe aux séances de CR est obligatoire



Mini-projets

Thermally Activated Delayed Fluorescence (TADF)

- **Project leader :** Jacky Arianne Megne Saheu
- **Main mentor :** M.R. Youbi K.

Given nowadays popularity of smartphones and many other potential applications, OLED materials and organic electronics are a very active field of research and industrial developments. The project aims to illustrate how advanced electroluminescence phenomena of OLED materials can be simulated and studied.

<https://www.scm.com/adf-modeling-suite/wizard/organic-electronics>



Mini-projets

TDDFT Study of three different Dihydroxyanthraquinones

- **Project leader :** Carelle Kherdine BISSOKO MOUT
- **Main mentor :** Job-Ravel Dontsa N.

The project aims to answer both scientific questions about the UV/Vis spectra of three different Dihydroxyanthraquinones as well as questions related to the model.

https://www.scm.com/doc/Tutorials/OpticalPropertiesElectronicExcitations/TDDFT_NBO.html



Mini-projets

Optimization with a Genetic Algorithm

- **Project leader** : Axelle Maeva DZEKOO MBIENDA
- **Main mentor** : Micheal Tinctcheu N.

The project aims to implemented a genetic algorithm (GA) for global structure optimization within **ase** (Atomistic Simulation Environment). The optimizer to be use is that of the module **ase.ga** which includes all classes needed for the optimizer.

https://wiki.fysik.dtu.dk/ase/tutorials/ga/ga_optimize.html



Mini-projets

Image Dependent Pair Potential for improved interpolation of Nudged Elastic Band (NEB) method initial guess

- **Project leader :** Nidelle Ariella TCHAMDJOU SIEMENI
- **Main mentor :** Kevin Ndang Amassa

The image dependent pair potential (IDPP) is a method that has been developed to provide an improvement to the initial guess for the NEB path. The IDPP method uses the bond distance between the atoms involved in the transition state to create target structures for the images, rather than interpolating the atomic positions. By defining an objective function in terms of the distances between atoms, The project aims to use the NEB algorithm with this image dependent pair potential to create the initial guess for the full NEB calculation.

<https://wiki.fysik.dtu.dk/ase/tutorials/neb/idpp.html>

