Title : From Data to Dynamics: How Machine Learning Potentials Are Transforming Atomistic Simulations

Abstract:

Artificial intelligence is revolutionizing theoretical chemistry and materials modeling by significantly expanding the capabilities of atomistic simulations beyond the traditional limits of density functional theory (DFT). Machine Learning Interatomic Potentials (MLIPs) have emerged as powerful tools that enable atomistic modeling across a wide range of applications, including conformational searches, catalysis, phase transitions, and mechanical property predictions. Leveraging over a decade of high-quality quantum mechanical data, modern universal, pre-trained MLIPs can represent a remarkable diversity of molecules and materials with reliable accuracy. Furthermore, these models can be fine-tuned to new systems, offering exceptional flexibility and scalability.

This seminar will highlight state-of-the-art developments through selected recent examples from the literature, demonstrating how MLIPs, whether based on physics-informed frameworks or neural network architectures, are now capable of accurately capturing complex atomic-scale behaviors across diverse chemical environments and dynamic conditions.

.--------------------------

Van-Oanh Nguyen Thi est enseignante-chercheuse au Département de chimie de l’Université Paris-Saclay et mène ses recherches à l’Institut de Chimie Physique (ICP) depuis 2004. Elle a effectué sa thèse en physique moléculaire sous la direction de Philippe Bréchignac et Pascal Parneix à l’Université Paris-Sud, sur les molécules aromatiques polycycliques (PAHs) d’intérêt astrophysique. Elle a ensuite réalisé un postdoctorat bilatéral entre l’Université d’Utah (États-Unis) et le CEA-Saclay, avant de rejoindre définitivement l’Université Paris-Saclay.

Ses travaux de recherche portent sur la modélisation moléculaire et l’utilisation de méthodes statistiques avancées appliquées à divers systèmes : liquides ioniques, cellulose, et nanoparticules métalliques.

Elle développe, en collaboration avec Carine Clavaguéra et Dominik Domin de l’ICP, Huy Pham (LLNL, États-Unis) et Cosmin Marinica (CEA Paris-Saclay), une nouvelle thématique de recherche consacrée à l’intégration de l’intelligence artificielle dans la simulation atomistique. Ses travaux portent en particulier sur l’utilisation des potentiels interatomiques basés sur le machine learning (MLIPs) pour la modélisation de nanoparticules bi- et trimétalliques, avec un intérêt croissant pour les matériaux à haute entropie. Cette approche est également appliquée à des matériaux fonctionnels, tels que des fibres artificielles à base de cellulose et de graphène pour des applications aérospatiales, ainsi qu’à la conception de bio-encres contenant des nanoparticles pour l’impression 3D de tissus biologiques.

Depuis 2021, elle est responsable du Master 2 SERP+ et du Master 2 Chemistry International Track. Elle coordonne également l’école d’hiver sur l’IA appliquée à la chimie et aux sciences des matériaux, organisée en partenariat avec les universités de Porto (Portugal), Gênes (Italie), Poznań (Pologne), McGill (Canada), et, à partir de février 2026, dans le cadre d’un nouveau programme structurant du Master SERP.