



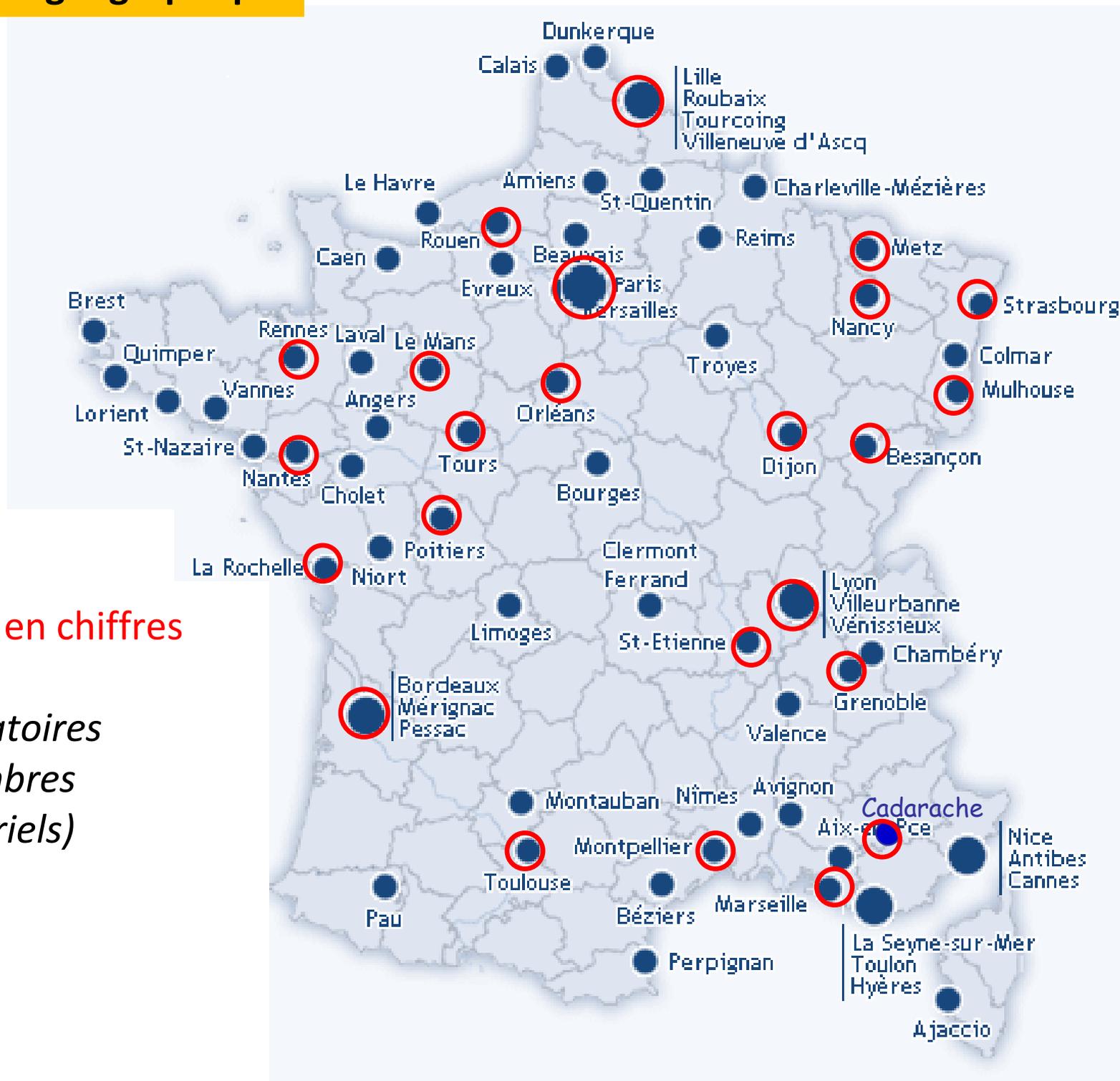
- **Mission**

- **fédérer la communauté des "simulateurs" en matière condensée:** rencontres et échanges entre théoriciens modélisant des matériaux réalistes, i.e. dans des conditions proches des observations expérimentales, voire des conditions et des propriétés d'usage (applications).
- **rassembler élaborateurs et utilisateurs de méthodes numériques issues des différentes approches** à l'échelle atomique, pour croiser des méthodes mêlant structure électronique (DFT, Liaisons Fortes) et physique statistique (Monte Carlo, Dynamique moléculaire), et s'attaquer à la problématique du changement d'échelle (comment remonter les informations, quelles sont les grandeurs pertinentes, faut-il chaîner ou coupler les approches ?).

- **Objectif du renouvellement**

- **pérenniser** le réseau construit lors du premier quadriennal, qui est très récent et pour l'instant encore en phase de consolidation, en renforçant les interactions entre les partenaires et en organisant des ateliers beaucoup plus ciblés sur des thématiques spécifiques.
- **approfondir la problématique du couplage entre les échelles** liée aux méthodes multi-échelles et de renforcer la thématique applicative, notamment d'intérêt industriel, en cohérence avec l'arrivée « massive » au GDR ModMat « seconde époque » de nouveaux partenaires issus du milieu de la recherche industrielle (EDF, AREVA, St Gobain, IFPEN, SOLVAY, STMicroelectronics, CEA LETI).

État des lieux géographique



ModMat en chiffres

60 laboratoires
320 membres
(8 industriels)

Objectifs scientifiques et stratégiques

- structuration:

renforcer la structuration de la communauté française en modélisation d'un matériau réaliste par **l'apprentissage et le partage** de l'ensemble des méthodes et outils à mettre en jeu.

- au niveau de la formation (école, ateliers):

former des véritables « spécialistes » de la **modélisation multi-échelle**

- qui maîtrisent les concepts et une partie des outils spécifiques à chaque échelle
- qui soient conscients de ce que représente un changement d'échelle (raccords sans artefacts).
- qui discutent avec les développeurs de méthodes/codes macroscopiques (paramètres pertinents ?).

- aspect sociétal:

modéliser (comprendre, simuler, prédire) le comportement de matériaux à fort aspect sociétal, parmi lesquels les **matériaux pour l'énergie** (renouvelable, nucléaire) **et pour la microélectronique** occupent une place singulière, tant en raison de leur aspect stratégique que de leur complexité.

- rencontre recherche fondamentale/appliquée:

faire se rencontrer des **acteurs de recherche (très) fondamentale** et des **acteurs, souvent industriels**, d'une recherche plus applicative pour la constitution d'un langage commun, d'une meilleure connaissance des problématiques, des questions, méthodes et outils existants d'une part et des interlocuteurs les plus pertinents dans ces domaines d'autre part.

- transfert de connaissance:

Une vision globale devrait faciliter le transfert des connaissances thésaurisées par la **recherche amont vers le monde de l'industrie**, et en retour faire peser **les enjeux de ce dernier sur la définition des programmes de recherche fondamentale**.

Financement de réunions

- réunions plénières: janvier 2017 à Rouen, mi 2018 à Paris, fin 2019 à Strasbourg)
- ateliers spécifique (appel à projets à venir).
- école « mixte » (janvier 2019?) de forme intermédiaire entre l'école (à destination des étudiants, *cf. Istres*) et les ateliers (version courte et condensée sur une problématique précise), ouverte à un public plus large mélangeant étudiants et permanents « sur les bancs des élèves ».

Soutien de collaborations

Des bourses (d'un montant à définir en fonction du projet, entre 250€ et 500€) seront accordées à des jeunes chercheurs/doctorants qui en feraient la demande pour se déplacer dans le cadre de collaboration entre groupes du GDR.

Un appel à projet sera fait dans ce sens, et l'attribution de la bourse décidée par le bureau sur la base du projet soumis.

Annuaire de la communauté ModMat

Construction d'une base de données ouverte des membres du GDR, qui renseignerait

- les thématiques,
- les outils (code),
- et autres principales informations,

sur la base d'une liste de mots clés scientifiques définissant chaque membre.

Cette liste pourrait être consultable et utilisable sous forme d'un tableau sur le site.

Un tel annuaire permettrait d'avoir une plus grande visibilité et favoriserait les échanges et collaborations.