

# GDR CNRS 3532 MODMAT: *Modélisation des Matériaux* (2012-2015)

- **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**

- *partage de l'information sur les méthodes, chaque équipe faisant connaître ses développements méthodologiques auprès d'une communauté qui utilise la simulation à l'échelle atomique, mais dont les matériaux ou les propriétés étudiées sont différents ou proches des siennes*
- *obtention de l'information et échange sur les différentes études menées par les autres membres du GDR. Ce partage des acquis sur la simulation à l'échelle atomique doit permettre de développer des collaborations au sein de la communauté des théoriciens des matériaux.*
- *apprentissage des différentes méthodes complémentaires, pour chaque usager, de ses propres méthodes: organisation d'ateliers et d'écoles avec séances « pratiques »*

## **1<sup>ère</sup> réunion plénière:**

état des lieux (référence nationale): recensement des méthodes et outils

apprendre à se connaître: qui fait quoi, où et comment)

définition des activités à venir

première évaluation de la communauté concernée: timing à corriger la prochaine fois

⇒ *essai d'équilibre thématique/géographique*

# État des lieux thématique

## Thèmes ou opérations

### 1) structure électronique :

- méthodes *ab initio*
- méthodes paramétrées : liaisons fortes
- potentiels interatomiques
- lien entre les différentes approches
- méthodes hybrides quantiques-classiques

### 2) méthodes statistiques :

- dynamique moléculaire
- Monte Carlo cinétique
- champ de phase
- méthodes multi-échelle

### 3) matériaux et propriétés

- oxydes de basse dimension
- alliages métalliques
- hétérostructures de semiconducteurs
- matériaux non cristallins

### 4) phénomènes spécifiques

- défauts étendus et plasticité
- défauts ponctuels et diffusion
- croissance et organisation
- transformations de phases

## Responsables

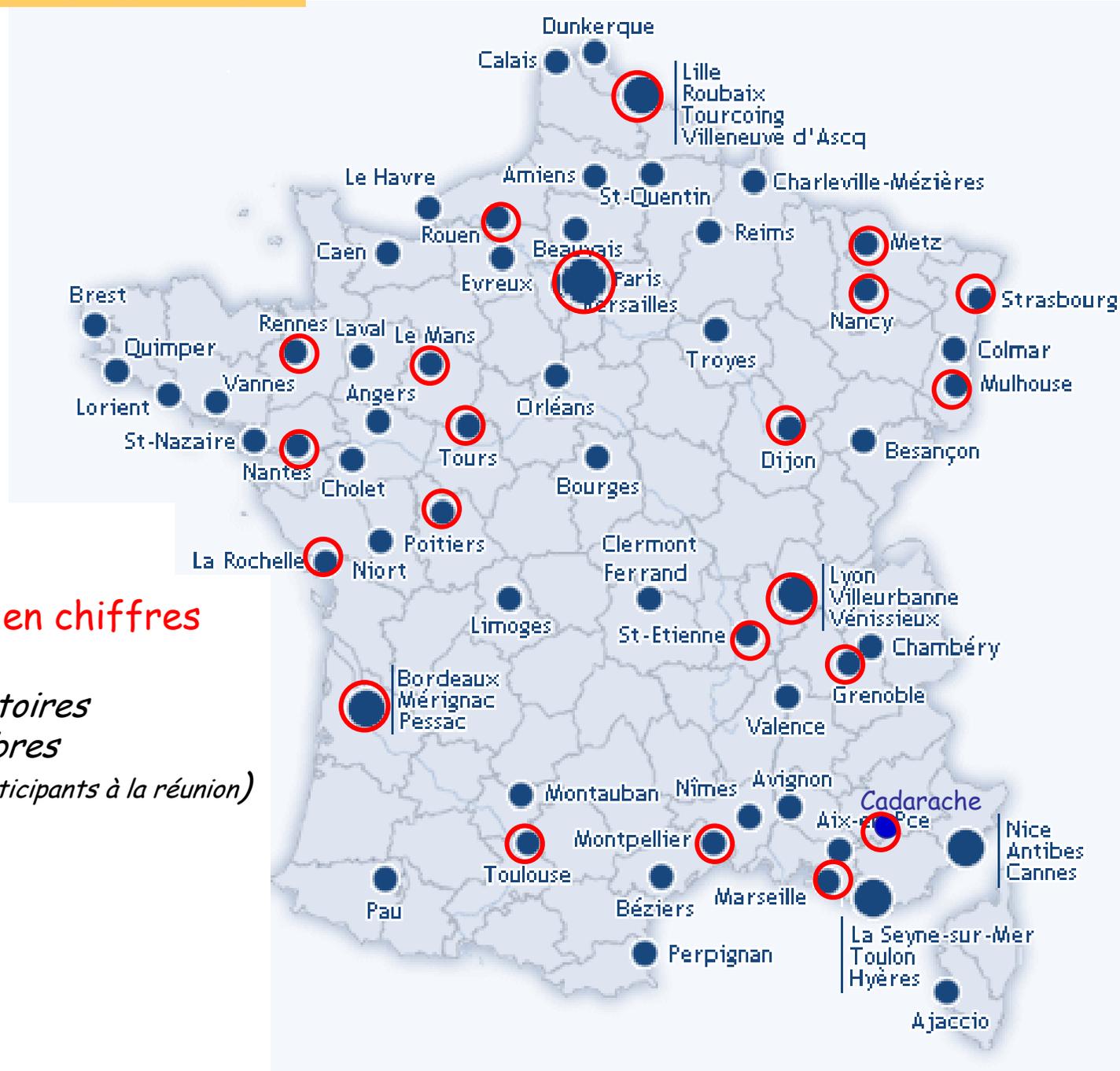
Michel Freyss (LLCC/CEA, Cadarache)  
Andrés Saúl (CINaM, Marseille)  
Hakim Amara (LEM/ONERA, Châtillon)  
Laurence Magaud (Institut Néel, Grenoble)  
Tristan Albaret (LPMCN, Lyon)

Magali Benoit (CEMES, Toulouse)  
Pascal Pochet (L\_Sim/CEA, Grenoble)  
Hélène Zapolsky (GPM, Rouen)  
Fabienne Ribeiro (IRSN, Cadarache),

Claudine Noguera (INSP, Paris)  
Fabienne Berthier (LEMHE, Orsay)  
Mehdi Djafari-Rouhani (LAAS, Toulouse)  
Jean-Louis Barrat (LIPhy, Grenoble)

David Rodney (SIMaP, Grenoble)  
Laurent Pizzagalli (Institut P', Poitiers)  
Hervé Bulou (IPCMS, Strasbourg)  
Alexandre Legris (UMET, Lille)

## État des lieux géographique



### ModMat en chiffres

*57 laboratoires*

*258 membres*

*(dont 94 participants à la réunion)*

## Historique et premier bilan

- atelier « fondateur » multi-échelle (Marseille, décembre 2010)
- élaboration et dépôt du dossier (octobre 2011)
- création du GDR n°3532 (janvier 2012)
- première réunion de bureau (avril 2013)  
*diffusion du compte-rendu*
- mise en place de la liste de diffusion (258 noms)  
*diffusion d'informations*
- mise en place du site Web du GDR  
*mise en ligne en décembre 2012*
- ateliers organisés ou soutenus:
  - atelier SIMADES V (Marseille 12-13 décembre 2012)
  - atelier FP-LMTO (Strasbourg, 17-20 décembre 2012)
- préparation de la première réunion plénière

## Activités à venir ?

- École au printemps 2014
- Deuxième réunion plénière (élargie !!!) fin 2014
- Ateliers
  - Rôle des responsables de thèmes ?*
- échanges pour favoriser collaborations (émergentes, existantes)
  - Rôle des responsables de thèmes ?*
- développement et mise en commun de codes ?
- soutien à l'organisation d'autres manifestations
- liens avec centres de calculs, « technologues », expérimentateurs
- liens avec autres GDR(-i)
  - CoDFT, Mécano, M2UN*

⇒ *discussion générale en conclusion de la réunion*

# Programme: journée du 21/02/2013

- **1) Structure électronique :**

- *- méthodes DFT*

- **10h20** 1.1 - E. Vathonne (CEA Cadarache)
- **10h40** 1.2 - A. Postnikov (LCP Metz)
- **11h00** 1.3 - A. Gellé (Institut Physique Rennes)
- **11h20** 1.4 - K. Boukari (IS2M Mulhouse)
- **11h40** 1.5 - R. Caracas (ENS Lyon)

(animateur : M. Saitta)

- **12h00 – 14h00** **Pause déjeuner**

- *- méthodes paramétrées : liaisons fortes*

- **14h00** 1.6 – A. Saúl (CINaM Marseille)
- *- potentiels interatomiques*
- **14h20** 1.7 - R. Tétot (LEMHE Orsay)
- **14h40** 1.8 - F. Calvo (LASIM Lyon)

(animateur : T. Albaret)

- **2) Méthodes statistiques :**

- *- dynamique moléculaire*

- **15h00** 2.1 - E. Lampin (IEMN Lille)
- **15h20** 2.2 - M. Hayoun (LSI Palaiseau)
- **15h40** 2.3 - L. Delfour (Néel Grenoble)

(animatrice : M. Benoit)

- **16h00 - 16h40** **Pause**

- *- Monte Carlo cinétique et croissance*

- **16h40** 2.4 - M. Perez (MATEIS Lyon)
- **17h00** 2.5 - A. Hémerlyck (LAAS Toulouse)

(animateur : F. Legoll)

- *- champ de phase*

- **17h20** 2.6 - H. Zapolsky (GPM Rouen)
- *- méthodes d'exploration du paysage énergétique*
- **17h40** 2.7 - D. Rodney (SIMAP Grenoble)
- **18h00** 2.8 - E. Machado (L\_Sim Grenoble)
- **18h20** 2.9 - P. Ganster (Mines St Etienne)

- **20h** **Repas du soir : banquet aux Arcenaux**

# Programme: journée du 22/02/2013

- **3) Matériaux et propriétés :**

(animateur : M. Djafari-Rouhani)

- - oxydes
- **8h50** 3.1 - G. Radtke (IMPMC Paris)
- **9h10** 3.2 - D. Costa (Chimie ParisTech)
- - métaux, alliages métalliques
- **9h30** 3.3 - H. Bulou (IPCMS Strasbourg)
- **9h50** 3.4 - R. Cortes (INSP Paris)
- **10h10** 3.5 - E. Gaudry (Mines Nancy)

- **10h30 – 11h00** **Pause**

(animateur N. Richard)

- - matériaux non cristallins
- **11h00** 3.6 - A. Tanguy (LPMCN Lyon)
- **11h20** 3.7 - L. Pizzagalli (Institut P' Poitiers)
- - matériaux d'usage
- **11h40** 3.8 - F. Ribeiro (IRSN Cadarache)
- - systèmes moléculaires et bio
- **12h00** 3.9 - M.-P. Gaigeot (LAMBE Evry)

- **12h20 – 14h00** **Pause déjeuner**

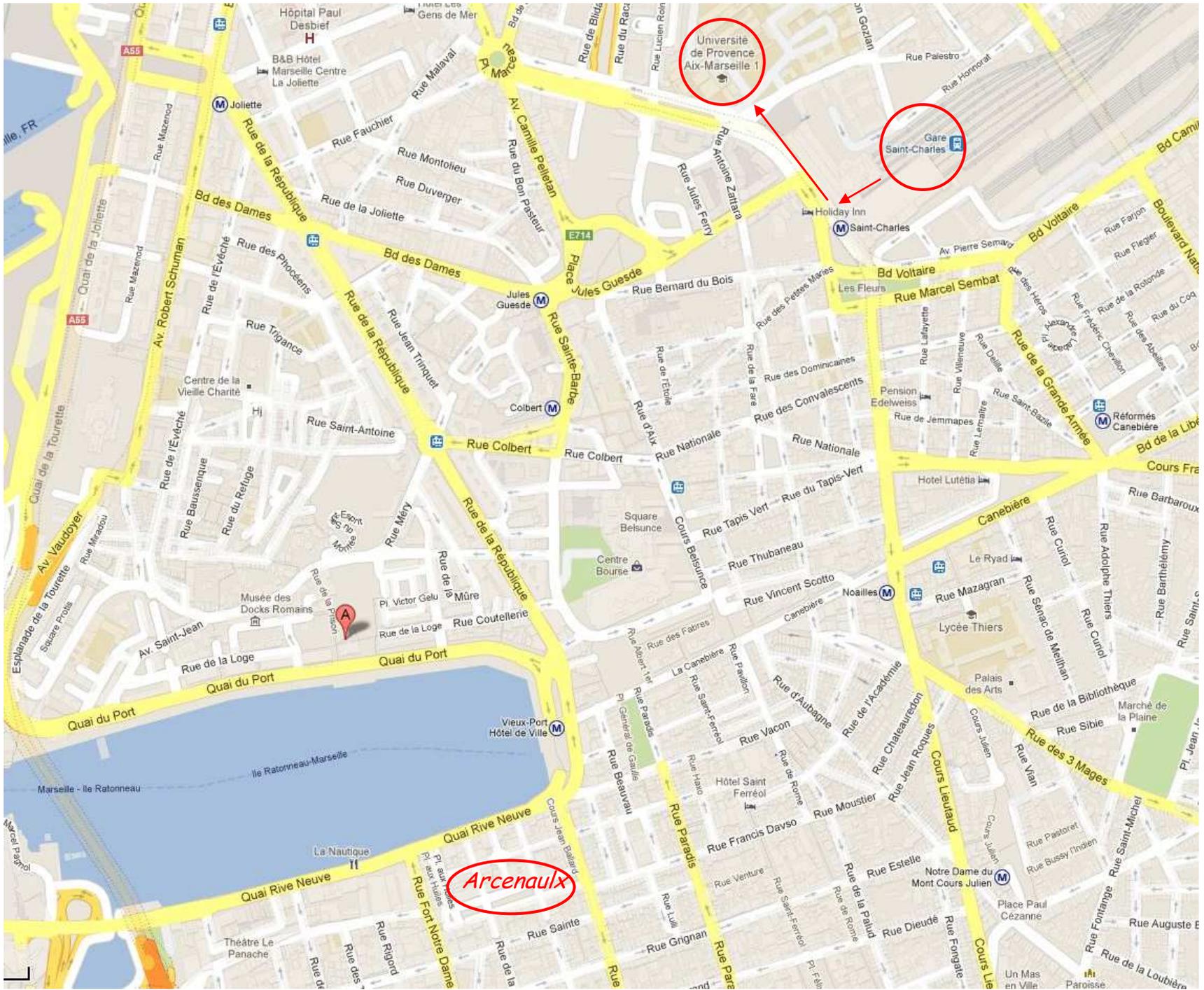
- **4) Défauts :**

- - défauts ponctuels et diffusion (animateur : P. Pochet)
- **14h00** 4.1 - A. Metsue (LEMMA La Rochelle)
- **14h20** 4.2 - J.-P. Crocombette (SRMP Saclay)
- **14h40** 4.3 - C. Varvenne (SRMP Saclay)

- **15h00 – 15h30** **Pause**

- - défauts étendus et plasticité (animateur : L. Proville)
- **15h30** 4.4 - P. Carrez (UMET Lille)
- **15h50** 4.5 - F. Lançon (L\_Sim Grenoble)
- **16h10** 4.6 - N. Combes (CEMES Toulouse)

- **16h30 Conclusions: bilan, perspectives**
- **Présentation des ateliers proposés**



## Activités à venir ?

- École au printemps 2014
- Deuxième réunion plénière (élargie !!!) fin 2014
- Ateliers
  - oxydes (*lien avec le GDR CoDFT ?*)
  - liaisons fortes: approches utilisées et codes disponibles
  - diffusion/croissance: dynamique de molécules sur surfaces
  - construction de potentiels
  - développements technologiques vs fondamentaux:
    - remontée d'information et propagation d'erreur issue du changement d'échelles
  - modélisation multi-échelle (*lien avec le GDR-I M2UN ?*)
    - recherche de cols, dynamique accélérée, métadynamique, QMMM
  - champ de phase (perte de cohérence)
  - défauts (*lien avec le GDR-I Mécano ?*)
  - solides non cristallins: verres (potentiels), polymères
- échanges pour favoriser collaborations (émergentes, existantes)
  - Rôle des responsables de thèmes
- développement et mise en commun de codes ?
- soutien (colloque plasticité, ...)
- établir des liens avec centres de calculs, « technologues », expérimentateurs