

Projet de Fédération de Recherche Nationale

Théories, Modélisations et Simulations Atomistiques

ThéMoSiA

Ce projet sera soumis à :

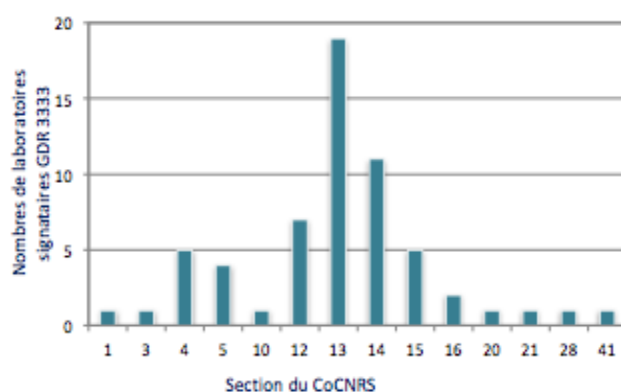
- Institut principal : Institut National de Chimie (INC)
- Institut secondaire : Institut National de Physique (INP)
- Institut secondaire : Institut National de Physique Nucléaire et de Physique des Particules (IN2P3)
- La section du Comité National principale
 - Chimie physique, théorique et analytique » (13)
- Les sections secondaires :
 - Atomes et molécules, optique et lasers, plasmas chauds (4)
 - Matière condensée : organisation et dynamique (5)
 - Architectures moléculaires : synthèses, mécanismes et propriétés (12)
 - Chimie de coordination, catalyse, interfaces et procédés (14)
 - Chimie des matériaux, nanomatériaux et procédés (15)
- La commission interdisciplinaire
 - Modélisation, et analyse des données et des systèmes biologiques : approches informatiques, mathématiques et physiques (51)

I – Contexte, enjeux et objectifs du projet

La communauté scientifique associées aux théories, modélisations et simulations atomistiques participe à l'avancée des recherches dans de nombreux domaines. Ainsi, elle est présente au sein de nombreux réseaux thématiques tels que des groupements de recherche (GDR) qui s'appuie souvent sur compétences complémentaires, interdisciplinaires, expérimentales et théoriques (liste donnée en annexe). La recherche d'interfaces entre les disciplines et les différentes applications est une des clés actuelles d'innovation en recherche fondamentale comme appliquée. Cependant, malgré des contextes et des thématiques différentes qui deviennent de plus en plus pointues, les méthodologies utilisées et développées peuvent être très comparables et se heurter aux mêmes défis. Il apparaît nécessaire de révéler ces similitudes, de permettre de partager les compétences et de combiner les efforts dans un but évident d'efficacité. Ce progrès ne peut se faire sans l'existence et la pérennité d'un socle large de compétences très pointues qui doivent être chacune être soutenue et ce pour la compétitivité de l'ensemble de la communauté.

Nous souhaitons créer une plateforme généraliste que toutes les personnes

développant ou utilisant des méthodologies qui vont de la mécanique quantique aux modélisations mésoscopiques puissent s'approprier pour échanger leurs points de vue, faire émerger de nouvelles pistes de travail et *in fine* de nouvelles collaborations et réalisations. Un tel réseau se doit d'être pérenne et visible, ce qui justifie de notre point de vue la création d'une fédération de recherche (FR). Cette proposition s'appuie sur une volonté commune dont un des terreaux est le GDR 3333 « Réseau français de Chimie Théorique (RFCT) » (<http://www.chimie-theorique.cnrs.fr>). Ce réseau au départ centré sur la chimie théorique a vu son contour évoluer de façon notable vers des personnes dont les recherches se classent dans la biologie, la physique ou encore les matériaux qui s'appuient sur les mêmes outils de recherche. Cette évolution associée aux enjeux mentionnés nécessite une adaptation de la structuration de la communauté qui doit s'équiper des instruments nécessaires. Les principales caractéristiques de l'organisation actuel sont données ci-dessous.



Le RFCT <http://www.chimie-theorique.cnrs.fr> est un GDR de l'Institut de Chimie du CNRS créé en 2010 (et renouvelé en 2014 et 2018) qui rassemble en son sein l'ensemble des chimistes théoriciens travaillant dans plus d'une cinquantaine de laboratoires de recherche académiques français. Il s'agit d'un réseau national rassemblant environ 300 chercheurs et enseignants-chercheurs ainsi que 150 doctorants. Cette communauté scientifique s'appuie sur un large socle de connaissances et d'outils communs tout en comportant un panel étendu de sous-disciplines. Le spectre de recherche dans lequel ses acteurs travaillent enveloppe la biologie, la chimie et la physique ce qui a pour conséquence d'avoir des chimistes théoriciens dans toutes les sections de l'Institut de chimie du CNRS (INC) mais également rattachés à l'Institut de physique (INP) et l'Institut des sciences biologiques (INSB).

Dans ce contexte de morcellement, il est crucial de maintenir une cohésion pour impulser une émulation entre les acteurs de la discipline afin d'assurer d'une part le maintien des compétences sur le territoire national mais surtout pour permettre un développement scientifique à la hauteur des défis scientifiques qu'elle est amenée à remplir. En effet, la simulation numérique a pris une place importante dans la recherche tant fondamentale qu'industrielle, le CNRS a d'ailleurs récemment estimé que 20% des chercheurs utilisent directement des moyens de calculs haute performance. La chimie théorique vise à développer des méthodologies mais aussi à

étendre les aptitudes de ces simulations numériques dans le but de pouvoir les appliquer à des problématiques vastes telles que la conception de nouveaux matériaux (thermo-électriques, multiferroïques, luminescents, semi-conducteurs pour le photovoltaïque, conducteur ioniques pour le stockage de l'énergie...), la compréhension des pathologies génétiques ou encore le développement de nouveaux catalyseurs. Cela permet non seulement de décrire mais également de prédire les phénomènes mis en jeu à différentes échelles. Ces directions ont d'autant plus d'importance lorsqu'elles s'associent à la recherche expérimentale, permettant de cibler les efforts. L'essor de cette discipline de la chimie est intimement lié aux développements des outils informatiques. En effet, les puissances de calcul sont telles, qu'à l'heure actuelle, les simulations permettent d'obtenir des résultats directement comparables à l'expérience. Cet essor est également indissociable de l'amélioration des modèles théoriques que la communauté élabore et implémente dans des logiciels libres et/ou commerciaux reconnus internationalement (cf. rapport de conjoncture du CNRS 2014, section 13). Au niveau européen, un effort particulier est également porté dans ce domaine de par la formulation même des appels à projet pour lesquels la modélisation est fortement encouragée et par les financements effectivement octroyés aussi bien sous forme de financements ERC (conseil européen de la recherche), ITN (infrastructure de recherche), ou FET (technologie future et émergente). Ces infrastructures ont d'ailleurs permis à un certain nombre de nos collègues de développer des idées originales et d'étendre leurs réseaux, montrant ainsi que la chimie théorique au travers des différents instituts en France est un axe soutenu régulièrement par l'Europe.

Il n'en demeure pas moins que la chimie théorique comme d'autres disciplines dites orchidées¹ en France est menacée car bien qu'indispensable, elle ne représente qu'une part limitée des chercheurs, souvent disséminés au sein des structures de recherche aussi bien publiques que privées. Les modifications récentes de l'offre d'enseignement ont également conduit à la quasi-disparition de la chimie théorique des formations master dans les filières universitaires. Néanmoins, la transmission des connaissances et le renouvellement des acteurs sont indispensables pour assurer sa continuité et son développement. De plus, la formation des expérimentateurs à la compréhension des bases théoriques, à l'utilisation des logiciels de chimie théorique ainsi qu'à l'utilisation des plateformes de calculs est en demande croissante. L'isolement de certains chercheurs est également une problématique à considérer et à laquelle le réseau français de chimie théorique répond. En effet, le réseau a un rôle fédérateur et permet de mettre en valeur l'excellence des recherches menées et les outils développés dans les laboratoires français dans un contexte de collaborations nationales et internationales soutenues. Ces riches collaborations doivent pouvoir bénéficier à l'ensemble de la communauté française au travers de conférences et séminaires dans un contexte de compétitivité internationale forte. **Dans ce cadre, la**

¹ Rapport sur les disciplines rares pour le ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche, Fabienne Blaise, Pierre Mutzenhardt, Gilles Roussel (16/12/2014) ; <http://www.enseignementsup-recherche.gouv.fr/cid87306/disciplines-rares-dans-les-universites-remise-du-rapport-a-najat-vallaud-belkacem.html>

transition d'un GDR vers une Fédération de Recherche permettra de représenter et de défendre les intérêts de la communauté par une structuration pérenne officiellement reconnue et soutenue au niveau national.

II. – Descriptif des axes du projet de la FR ThéMoSiA

Le chantier majeur du mandat 2018-2022 du RFCT est la mise en place d'une Fédération de Recherche nationale, ce qui permettra de pérenniser le travail de structuration et d'animation de la communauté scientifique réalisé par le GDR depuis maintenant près de dix ans.

Cette évolution est une réponse à la non adéquation de la structuration en GDR du réseau par rapport à son contour à ses objectifs. La création d'une fédération plus globalisante et généraliste est aussi impulsée par l'évolution de la recherche actuelle vers des applications de plus en plus multi-disciplinaires et/ou à l'interface de plusieurs domaines, ce qui implique le développement et l'usage de nouveaux outils théoriques et des mutations méthodologiques et pour répondre à ces enjeux. C'est l'un des objectifs de la fédération que de **soutenir les recherches à chaque échelle** (pour celles non structurées en GDR notamment), **de créer les passerelles qui permettront un partage de connaissances entre communautés** sachant que la même théorie/méthodologie peut être utilisée pour plusieurs objets d'études, et également **d'initier des interfaces entre méthodes voire l'émergence de nouveaux concepts**.

Le conservation d'une structuration nationale est cruciale pour maintenir la formation théorique nécessaire aux doctorants et futurs collègues sachant que très peu de Master permettent d'acquérir les bagages scientifiques nécessaires. La formation continue couvrant un très large spectre est également un point clé de la FR pour l'acquisition de nouvelles connaissances par tous. Le réseau actuel y contribue par différente action régionale et nationale et la fédération permettra certainement de renforcer et améliorer ses actions.

Il nous est apparu également important d'inclure un volet logiciel au projet, sachant que nombreux codes et procédures de post-traitement sont développés en France. Dans ce cadre, un volet de la fédération est donc de développer une logithèque. En effet, il est important de permettre aux équipes qui le souhaitent de les diffuser et d'avoir la possibilité de les pérenniser via une structure nationale avec un volet formation à l'utilisation des logiciels. L'objectif de cette action est également de soutenir les collaborations inter-équipe dans ce domaine de développement logiciel.

Structuration du projet – La forme actuelle du projet de création de FR s'articule autour de trois axes principaux :

- **Axe recherche** : le projet couvrira l'ensemble des thématiques associées aux théories et modélisations atomistiques, avec une coloration vers les modélisations multi-échelles pour ce premier mandat, dans le but de stimuler de nouvelles collaborations au sein de notre communauté. Des rencontres

prospectives ont été organisées les 11, 12 et 13 juin pour nourrir la réflexion autour de l'état de l'art, des verrous et des solutions que la fédération pourrait adopter.

- **Axe logithèque** : cet axe concernera l'identification, mise en place d'un répertoire national et mise à disposition, sur la base du volontariat, des codes de calculs développés dans nos laboratoires.
- **Axe formation** : il s'agira ici de se focaliser sur la formation initiale d'étudiants de Master ou de thèse (label), la mise en place de cours et formation en ligne, la formation par les développeurs de codes aux utilisateurs, etc.

La FR permettra également d'avoir une visibilité et un poids face aux enjeux que sont pour nous les moyens de calculs (Tiers 0-3), la gestion des licences, la mise en place des formations universitaires, le positionnement international...

III. 2 – Gouvernance de la FR ThéMoSiA

Sous l'impulsion de l'Institut de Chimie du CNRS, un comité scientifique (CS) a été mis en place pour guider l'évolution de notre structuration vers une fédération, il comprend :

Thierry Deutsch (L_Sim CEA, Grenoble)

Georg Jansen (University of Duisburg-Essen)

Lucie Delemotte (KTH Royal Institute of Technology, Stockholm)

Fabien Gatti (ISMO, Orsay)

Ilaria Ciofini (i-CLeHS, Chimie ParisTech)

Jean-François Dufrêche (ICSM/LMCT, Marcoule)

Le CS s'est réuni une première fois en juin dernier lors des Rencontres Prospectives de Nantes. En tenant compte de leurs conclusions et des retours de la communauté, le comité de pilotage mis en place pour préparation de la Fédération (P. Carbonnière, K. Costuas, R. Maurice et S. Sacquin-Mora) a rassemblé les contributions des chargés de mission de l'actuel GDR et des contributions de la communauté.

Comptes tenus du fait que les directions régionales et les chargés de mission ont été élus en 2018 et qu'ils sont à l'initiative des changements actuels permettant de mettre en place la fédération, il apparaît important qu'une continuité se fasse sur la première moitié de la mandature. En effet, de nombreux projets d'envergure ont déjà démarré et nécessitent du temps pour aboutir. Il apparaît également important de maintenir le CS essentiel pour guider la politique scientifique et assurer un suivi. Le conseil scientifique comprendra également des représentants des instituts et du comité national du CNRS. Des élections renouvelant tous les postes de directions et les chargés de mission seront mises en place en milieu de mandat selon le règlement intérieur qui sera établi en début de mandature.

Le comité exécutif s'appuiera sur le conseil d'unité, composé des membres du comité de direction, des chargés de mission et représentants régionaux élus et des représentants des laboratoires de la fédération dont le nombre sera défini à la mise en place du règlement intérieur. Ce conseil d'unité se réunira au minimum annuellement pour faire le bilan de ses activités et décider des actions à mener.

