

Le groupe "simulation numérique" animé par F. Lançon, compte actuellement 4 permanents (avec l'arrivée de P. Hecquet et le départ de S. Goedecker) et 2 thésards. C'est un groupe particulièrement actif, qui joue un rôle important au sein du SP2M, que ce soit en termes de notoriété (publications dans les meilleures revues, multiples invitations internationales) ou par la demande croissante de "service" émanant des expérimentateurs du laboratoire. La grande force de ce groupe est son aptitude à concilier au plus haut niveau le développement de méthodes numériques performantes et leur application à des problèmes délicats de science des (nano)matériaux, couplant thermodynamique et cinétique (diffusion), structures atomique, électronique, chimique.

En ce qui concerne les outils, le groupe développe à la fois des méthodes de calcul de structure électronique *ab initio* (proposition d'une alternative aux bases d'ondes planes en termes d'ondelettes, construction de nouvelles fonctionnelles d'échange et corrélation, développement du code "abinit" via le GDR DFT) et des méthodes statistiques sophistiquées de type Monte Carlo et Dynamique Moléculaire (exploration exhaustive du paysage énergétique pour rechercher les cols), qu'ils couplent par exemple dans le cadre de simulations de Monte Carlo cinétique dont les barrières ont été calculées *ab initio*.

En ce qui concerne les problèmes abordés, on retiendra en particulier les belles études de la diffusion dans Si et SiGe (avec l'identification d'un nouveau type de défaut tétracoordonné particulièrement "efficace"), l'hypofriction d'interfaces incommensurables, la reconstruction en chevron d'une surface d'or à l'émergence d'un joint de phases confirmée par TEM (Berkeley). De façon générale, le choix des systèmes étudiés prend très largement en compte la suggestion faite par le dernier conseil scientifique de renforcer le lien avec les expérimentateurs du laboratoire, ce qui se manifeste sous un double aspect : mise en œuvre d'outils adaptés à une technique spécifique comme le TEM ou la Diffraction de RX (reconstruction d' $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), mais aussi modélisation de propriétés : dopage de Si et SiGe, diffusion de défauts dans SiGeC contraint, modification du champ d'échange à l'interface Co/NiO par insertion d'une couche d'Au. Ce dernier volet (propriétés) fait d'ailleurs l'objet de sollicitations de plus en plus pressantes des expérimentateurs (agrégats, couches minces d'alliage) ... ce qui atteste du bien fondé de la décision de la direction de renforcer le groupe par l'embauche d'un nouveau permanent, et suggère qu'il serait souhaitable d'axer le profil correspondant sur la modélisation des propriétés (transport, magnétisme) afin de conforter la place essentielle de l'activité modélisation au SP2M.