

RÉSUMÉ FINAL DE L'ÉVALUATION DE L'UNITÉ :

Modélisation et exploration des
matériaux (MEM)

SOUS TUTELLE DES ÉTABLISSEMENTS ET ORGANISMES :

Commissariat à l'énergie atomique et
aux énergies alternatives – CEA
Université Grenoble Alpes - UGA

CAMPAGNE D'ÉVALUATION 2019-2020
VAGUE A

Rapport publié le 26/06/2020



Pour le Hcéres¹ :

Nelly Dupin, Présidente par
intérim

Au nom du comité d'experts² :

Jean Daillant, Président du comité
d'experts

En vertu du décret n°2014-1365 du 14 novembre 2014 :

¹ Le président du Hcéres "contresigne les rapports d'évaluation établis par les comités d'experts et signés par leur président". (Article 8, alinéa 5) ;

² Les rapports d'évaluation "sont signés par le président du comité". (Article 11, alinéa 2).

Les données chiffrées présentées dans les tableaux de ce document sont extraites des fichiers déposés par la tutelle dépositaire au nom de l'unité.

PRÉSENTATION DE L'UNITÉ

Nom de l'unité :	Modélisation et exploration des matériaux
Acronyme de l'unité :	MEM
Label et N° actuels :	UMR 9001
ID RNSR :	200717446M
Type de demande :	Renouvellement à l'identique
Nom du directeur (2019-2020) :	M. François RIEUTORD
Nom du porteur de projet (2021-2025) :	M. Thierry DEUTSCH
Nombre d'équipes et /ou de thèmes du projet :	6 équipes

MEMBRES DU COMITÉ D'EXPERTS

Président :	M. Jean DAILLANT, Synchrotron Soleil, Saint Aubin
	M. Xavier BOUJU, CNRS, Toulouse (représentant du CNU)
	M. Gregory CHABOUSSANT, CNRS, Saclay
Experts :	M. Franck FAYON, CNRS, Orléans
	M. Renaud PODOR, CNRS, Marcoule (personnel d'appui à la recherche)
	Mme Nathalie VAST, CEA, Palaiseau

REPRÉSENTANT DU HCÉRES

M. Alain PONTON

REPRÉSENTANTS DES ÉTABLISSEMENTS ET ORGANISMES TUTELLES DE L'UNITÉ

Mme Pascale BAYLE, IRIG/CEA Grenoble
Mme Elsa CORTIJO, DRF/CEA
M. Hervé COURTOIS, UGAI

INTRODUCTION

HISTORIQUE, LOCALISATION GÉOGRAPHIQUE ET ÉCOSYSTÈME DE RECHERCHE

Le "service" MEM (Modélisation et Exploration des Matériaux) a été créé le 1^{er} janvier 2016 avec pour tutelles le Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives (CEA) et l'Université Grenoble Alpes (UGA). Il fait partie de l'Institut de Recherche Interdisciplinaire de Grenoble (IRIG). L'unité est implantée dans différents bâtiments du CEA, de l'Institut Laue-Langevin (ILL) et de l'European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) à Grenoble.

Six « laboratoires » que l'on appellera « équipes » par la suite, ont été rassemblées au sein de l'unité :

Le laboratoire de Simulation Atomistique (L_SIM) qui faisait initialement partie du Service de Physique des Matériaux et Microstructures (SP2M).

Le Laboratoire d'Étude des Matériaux par Microscopie Avancée (LEMMA) qui faisait également partie du SP2M.

Le laboratoire Magnétisme et Diffraction Neutronique (MDN) appartenait initialement au Service de Physique Statistique, Magnétisme et Supraconductivité (SPSMS).

Le laboratoire Nanostructures et Rayonnement Synchrotron (NRS) appartenait initialement au SP2M. Il opère un Collaborative Research Group (CRG) à l'ESRF, principalement pour l'étude de nanostructures et de surfaces par des techniques de rayons X sous incidence rasante.

Le laboratoire de Résonance Magnétique (RM) appartenait au Service de Chimie Inorganique et Biologique (SCIB).

Le Service Général de Rayons (SGX) exploite un parc de diffractomètres au service de l'institut et contribue à des recherches sur les matériaux pour l'énergie et la microélectronique.

DIRECTION DE L'UNITÉ

L'Unité a été dirigée depuis sa création par François Rieutord. Thierry Deutsch en était le Directeur Adjoint.

NOMENCLATURE HCÉRES

ST2 – Physique

THÉMATIQUES DE L'UNITÉ

L'unité est organisée autour de méthodes numériques et de techniques expérimentales : simulation (DFT, approches à N-corps au-delà de la DFT, méthodes de liaisons fortes), microscopie électronique, RMN et hyperpolarisation par polarisation nucléaire dynamique (PND), diffraction des rayons X, diffusion neutronique.

Ces méthodes permettent d'aborder des thématiques scientifiques variées, généralement en collaboration, et le plus souvent en s'appuyant sur des axes forts localement comme par exemple :

- la détermination de la structure électronique et du rôle des défauts dans les semiconducteurs et matériaux bidimensionnels (méthodes numériques et microscopie électronique) ;
- la prédiction du transport électronique dans des qubits d'intérêt dans l'environnement grenoblois ;
- les nanostructures (rayonnement synchrotron, microscopie électronique, résonance magnétique nucléaire (RMN));
- le magnétisme et les systèmes fortement corrélés (diffusion neutronique) ;
- les matériaux pour l'énergie (batteries au lithium, perovskites pour le photovoltaïque) ;
- les matériaux organiques et dispositifs à matériaux organiques (méthodes numériques à N-corps) ;
- et enfin, les matériaux biologiques et biomolécules (microscopie électronique, RMN).

EFFECTIFS DE L'UNITÉ

Modélisation et Exploration des Matériaux (MEM)		
Personnels en activité	Nombre au 30/06/2019	Nombre au 01/01/2021
Professeurs et assimilés	0	0
Maîtres de conférences et assimilés	3	3
Directeurs de recherche et assimilés	0	0
Chargés de recherche et assimilés	1	1
Conservateurs, cadres scientifiques EPIC, fondations, industries...	31	31
Professeurs du secondaire détachés dans le supérieur	0	0
ITA-BIATSS, autres personnels cadre et non cadre EPIC...	10	10
Sous-total personnels permanents en activité	45	45
Enseignants-chercheurs non titulaires, émérites et autres		NA
Chercheurs non titulaires, émérites et autres (excepté doctorants)	10	NA
Doctorants	10	NA
Autres personnels non titulaires		NA
Sous-total personnels non titulaires, émérites et autres	20	NA
Total personnels	65	45

AVIS GLOBAL SUR L'UNITÉ

La production de l'unité est excellente et bien répartie entre les équipes. Certains développements (code BigDFT et codes implémentant des méthodes au-delà de la DFT, microscopie électronique, polarisation dynamique nucléaire en RMN, diffusion magnétique des neutrons...) bénéficient d'une large reconnaissance et se situent au meilleur niveau international. L'unité participe à de nombreux projets nationaux et internationaux.

Au-delà des publications, les développements méthodologiques, instrumentaux et de logiciels sont abondants et l'unité a une importante activité de service.

L'unité a un bon niveau de collaborations en dehors du monde académique. En particulier, elle exploite bien les potentialités offertes par l'écosystème grenoblois dans le domaine de la microélectronique. Plusieurs brevets dans lesquels des agents de l'unité figurent comme inventeurs ont fait l'objet de licences, démontrant la pertinence de ces activités d'un point de vue socio-économique.

L'unité accueille un nombre conséquent d'étudiants en doctorat mais ceux-ci sont inégalement répartis entre les équipes. Sa participation à l'enseignement est limitée quoiqu'elle ait une tutelle universitaire. Elle a en revanche une implication forte dans l'école européenne HERCULES sur l'utilisation des synchrotrons et sources de neutrons.

L'unité se caractérise par une organisation en équipes (laboratoires dans la nomenclature du CEA) centrés sur des méthodes numériques ou expérimentales. Son fonctionnement est sain. De création récente, elle doit cependant encore travailler à sa cohésion dans un contexte de forte dispersion géographique des équipes.

La limitation des ressources financières et humaines avec des départs en retraite prévus prochainement risque de conduire à des choix stratégiques difficiles alors que l'unité a en charge un parc expérimental lourd avec une forte composante de service.

Des cas de d'épuisement professionnel ont été relevés et la prévention des risques psycho-sociaux demande une forte attention.

Les projets proposés pour la future période quinquennale sont pertinents et bien adaptés à l'environnement scientifique de l'unité.

Les rapports d'évaluation du Hcéres
sont consultables en ligne : www.hceres.fr

Évaluation des coordinations territoriales
Évaluation des établissements
Évaluation de la recherche
Évaluation des écoles doctorales
Évaluation des formations
Évaluation et accréditation internationales



2 rue Albert Einstein
75013 Paris, France
T. 33 (0)1 55 55 60 10

hceres.fr

[@Hceres_](https://twitter.com/Hceres_)

[Hcéres](https://www.youtube.com/Hceres)

