

DIADEM – Développer des matériaux innovants, performants, durables et issus de matières premières non critiques et non toxiques

Les matériaux conditionnent largement la compétitivité de l'industrie par l'innovation qui, dans le contexte de la transition écologique et du développement durable, doit plus que jamais s'inscrire dans une trajectoire vertueuse intégrant aspects économiques, environnementaux et sociétaux. Le projet vise un programme ambitieux d'accélération de la conception et de l'arrivée sur le marché de matériaux plus performants, durables et issus de matières premières non critiques et non toxiques, contribuant ainsi au développement économique de la France. Un tel programme doit combiner de façon intégrée modélisation, simulation numérique, méthodologies associées à l'intelligence artificielle (IA), technologies de synthèse/criblage et caractérisation à haut débit. L'objectif est d'identifier de nouveaux matériaux en réponse à des spécifications données, avec une rapidité inaccessible à la démarche purement expérimentale, où la percée est souvent aléatoire.

DIADEM prévoit la mise en place d'équipes et de centres de compétences intégrés, rassemblant 4 plateformes qui doivent permettre une accélération d'un facteur deux à cinq du cycle d'identification de matériaux - de 20 ans à entre 4 et 10 ans.

1- synthèse combinatoire et/ou à haut débit de matériaux : Les différentes méthodes de fabrication additive sont clés pour élaborer rapidement de nouvelles compositions de matériaux (métalliques, céramiques, polymères potentiellement bio sourcés) mais aussi de nouvelles architectures parfois évolutives sous l'action d'un stimulus comme dans le cas de l'impression 4D. L'ingénierie des couches minces devient souvent incontournable pour atteindre les performances finales souhaitées. Une attention toute particulière sera également portée à la synthèse de nouveaux matériaux architecturés, composites, hybrides, bio-inspirés ou non afin d'optimiser leurs propriétés structurales ou fonctionnelles : semi-conducteurs inorganiques ou hybrides organique-inorganique, puits quantiques, hétérostructures, nano-objets... Le changement d'échelle de ces synthèses de laboratoire permettra de nouveaux procédés industriels plus rapides et à plus faibles impacts environnementaux.

2- caractérisation à haut débit : Il s'agira de caractérisation chimique, structurale (Grands Instruments Soleil et ESRF), de propriétés d'usage (optiques, magnétiques, mécaniques, résistance à la corrosion...), de développement de capteurs associés à la caractérisation in situ ou operando, essentiels pour l'accès au haut débit et la collecte des volumes massifs de données, en particulier en conditions extrêmes.

3- simulation numérique des matériaux et des procédés : Les outils de simulation multi-échelles, de l'ab initio à l'échelle macroscopique, incluant les approches d'IA seront rendus plus faciles d'utilisation, interopérables entre eux et intégrés dans des flux de tâches pour permettre des calculs automatiques et/ou à haut débit.

4- bases de données destinées au stockage, à la gestion et l'exploitation par l'IA : Les expériences et la modélisation seront davantage automatisées, les données en résultant structurées en bases suivant une stratégie à arbitrer (connexion à des bases locales existantes ou lancement d'une base nationale), des outils d'IA spécifiquement développés pour améliorer leur exploitation.

Pilotes scientifiques : CEA, CNRS

Partenaires du programme : Université Paris-Saclay, Sorbonne Université, Institut Polytechnique de Paris, Université Grenoble-Alpes, Université de Lorraine, Université de Bordeaux, Université de Lyon