**Feuille de route**

**Sciences de base pour l’Energie**

***Caractérisation couplée des matériaux/interfaces & Instrumentation***



**Sciences de base pour l’Energie :**

**Caractérisation couplée de matériaux/interfaces & Instrumentation**

1. **Eléments contextuels spécifiques liés aux problématiques de caractérisation**

Des progrès significatifs peuvent être espérés en matière de caractérisation expérimentale dans le domaine de l’énergie, en se confrontant à un certain nombre de difficultés de différents types:

1. **Présence d’échelles multiples d’observation**
   * Cascade d'échelles d’observation spatiale
   * Cascade d'échelles d’observation temporelles : existence de dynamiques rapides ou très lentes
2. **Présence de couplages de différents types**
   * Couplages multi-physiques
   * Multi-matériaux (interactions de matériaux entre eux, pas uniquement aux interfaces)
   * Conditions extrêmes d’observation.
   * Couplage entre observations expérimentales et calculs / modélisations.
3. **Problématiques de l’obtention (data mining) et de l’exploitation/traitement (big data) des données expérimentales massives**

La structuration de l’effort à fournir est rendue difficile du fait de la multiplicité des domaines et des applications concernés.

1. **Principaux verrous identifiés**

Pour faire progresser les sciences de base pour l’énergie dans le domaine de la caractérisation (matière brute, manière structurée, devices), il est nécessaire de répondre à plusieurs besoins :

* 1. **Besoin de rapprocher davantage l’observation de l’échelle nanométrique et atomique**

1. Nécessité d’obtenir de l’information couplée topologie-propriété à ces échelles.
2. Maîtrise de la structuration de la matière à ces échelles.
3. Nécessité d’observer la matière organisée à ces échelles.
4. Nécessité de manipuler la matière à ces échelles.
5. Instrumentation : problèmes de résolution spatiale à ces échelles.
   1. **Besoin de traquer la dynamique temporelle sur plusieurs échelles de temps**

Le suivi dynamique des processus est essentiel pour identifier les sources dissipatives et les limitations cinétiques. S’il est possible d’observer des structures ou des processus en évolution à différentes échelles, la difficulté réside dans la capture des dynamiques temporelles associées.

* + 1. Réactivité chimique : détection et analyse temporelle de phénomènes réactionnels à des échelles de temps très variables, de la femtoseconde (électrons solvatés et relaxation ; exemple : Elyse, LCP, Orsay) à la milliseconde (intermédiaires réactionnels) et au-delà (cinétiques globales).
    2. Processus physiques (écoulements, transferts) : du phénomène convectif rapide à des écoulements/déformations bien plus lents (exemple, des matériaux très pâteux qui se déforment : limite entre mécanique des fluides et mécanique des solides).
    3. Nécessité d’observations dynamiques à la méso-échelle (sans interactions dominantes entre le nano et le micro =continuum).
  1. **Besoin de coupler des échelles spatiales et temporelles diverses**
     1. moyens d’extrapolation sur des temps longs, prise en compte des cycles de vie (ACV) et des problématiques liées au recyclage des matériaux.
     2. Besoin d’observer et de caractériser les dynamiques temporelles à différentes échelles spatiales, in situ et in operando. Exemples : (i) phénomènes de transport (électrodes de batterie, piles à combustible) ; (ii) analyse du vieillissement accéléré des matériaux dans l’environnement device pour optimiser les conditions de fonctionnement et réduire les cinétiques de dégradation, voire d’identifier les prémices de rupture.
     3. Les caractéristiques du rayonnement synchrotron : nécessité de gagner un facteur 100 en flux. Obligé de mettre des filtres pour ne pas abimer les échantillons.
  2. **Besoin de développer les couplages multi-physiques et les liens avec le numérique**
     1. Il existe un besoin de couplage multi-physiques à diverses échelles spatio-temporelles: effectuer des mesures multiphysiques (chaque technique apportant des informations différentes et complémentaires) à des échelles de temps et d’espace variables, puis d’assembler ces informations pour aboutir à une compréhension macroscopique assise sur des observables élémentaires. Exemple en électrocatalyse : couplage AFM (topologie) + SECM (propriétés de transfert de charge) + Raman (vibrations) + synchrotron (état chimique des catalyseurs et modes vibratoires).
     2. Il est nécessaire de développer des approches multi-physiques couplées et non-intrusives, in situ et in operando (exemple: disposer d’ici 15 ans d’outils spécifiques pour l’étude du vieillissement in operando de matériaux fonctionnels).
     3. Besoin d’adapter certains équipements et instruments à l’échelle de l’ingénieur te de faire de l’analyse multiphysique ; exemple : explorer un stack électrochimique complet en opération sous neutrons, rayonnement synchrotron ou en IRM. Cela permettrait d’analyser les processus de dégradation dans l’environnement de fonctionnement.
  3. **Besoins spécifiques sous conditions extrêmes**

Un niveau de complexité supplémentaire vient de la nécessité, dans certains cas, d’effectuer ces mesures/analyses dans des conditions extrêmes ou hétérogènes :

* + 1. Conditions extrêmes de températures, pressions, rayonnement.
    2. Milieux polyphasés fortement hétérogènes, avec une structuration à différentes échelles spatiales.
    3. Besoin de prendre en compte des facteurs de stress spécifiques. Exemple : utiliser l'irradiation (utilisée pour la mesure) pour accélérer le vieillissement.
  1. **Problématique numériques** (interface Allistène – Ancre)
     1. Besoin de gérer des flux massifs de données expérimentales.
     2. Besoins d’uniformisation des formats de données et d’accès à des bases de données partagées.
     3. Besoin de coupler des données complémentaires provenant de sources et de techniques de caractérisation différentes (voir de simulation ou de calcul).
     4. Besoins d’outils et de méthodologies de traitement de données et de bases de données de grande taille (10^15 bytes). Exemple sur les synchrotrons : comment stocker ces données, comment y accéder ensuite.
     5. Nécessité de coupler approches expérimentales et simulation (liens avec le séminaire 1).
  2. **Besoin méthodologiques et organisationnels**
     1. Besoin de normaliser certains protocoles de test. Exemple : certains cycles de vieillissement normalisés existent mais ne correspondent pas aux besoins des applications.

1. **Les moyens à mettre en oeuvre pour lever ces verrous**
2. **Démarche proposée**
3. Expression de besoins de la communauté SdB à destination des développeurs d’instruments (monde académique, grands instruments, secteur privé). Organisation d’un colloque instrumentation aux limites (cf. action CNRS du même nom).
4. Identifier les acteurs académiques et industriels à impliquer dans le développement des outils nécessaires à l’analyse multi-physique à différentes échelles temps-espaces ?
5. Identifier les limites existantes dans le domaine des capteurs/détecteurs et de la métrologie (échantillonnage de grandeurs physiques à des cadences très élevées sur des durées assez longues).
6. Identifier les démarches à encourager : innovation instrumentale en laboratoire puis transfert technologique ou développement du partenariat public / privé pour assurer les transferts de technologiques.
7. Recenser les domaines scientifiques dans lesquels des problématiques similaires existent. Exemple : physique des particules, analyse des cinétiques chimiques rapides.
8. Recenser de possibles formations sur l’instrumentation extrême (exemple, le CERN).
9. **Mesures pour structurer la communauté SdB pour l’énergie**

Des approches mutualisées doivent être mise en place dans différents domaines pour structurer une communauté multi-disciplinaire :

1. Structuration de communautés/plateformes : développement d’infrastructures de recherche délocalisées en France, mutualisation de moyens mi-lourds (ex- RMN-IRM pour l’ingénierie)
2. Besoins spécifiques sur les propriétés thermodynamiques des matériaux (exemples : plateforme de caractérisation pour mesure de conductivité car besoin de standardiser les mesures et de rationaliser les coûts ; analyse thermique et calorimétrique ; spectroscopie infrarouge) ; Disposer d'une plateforme nationale faisant appel à des compétences nationales sur des sites multiples. Action à confier à la SFT?
3. Traitement/partage des données : besoin de réflexion sur les bases de données partagées ; intérêt de confier la gestion à un service national adhoc.
4. Développement spécifique de capteurs/détecteurs
5. Développer des interfaces avec les grands instruments (ex. synchrotrons, neutrons).
6. **Développement d’interfaces avant le monde du numérique et la simulation (Allistène).**
7. Développement de bases de données partagées (important pour expérimentateurs et simulateurs). 🡪 définir des normes de stockage, définir des règles de données partagées, de confiance d’accès aux bases, de confidentialité.
8. Algorithmique, outils de gestion 🡪 développer des techniques d’analyses de données et de fusion de données (combiner des données complémentaires provenant de sources et de techniques de caractérisation différentes).
9. Traitement des données massives 🡪 professionnaliser le développement des données massives ; adjoindre des équipes de numériciens. Développer des outils de Deep learning et de systèmes experts (besoin de données normalisées et adaptées au deep learning, formalisation des fichiers de données).
10. Nécessité de renforcer les interactions entre le développement de moyens de simulation et les besoins expérimentaux SdB-énergie.
11. Nécessité de développer des approches multi-échelles (temps-espace) analogues à celles développées pour les développements expérimentaux.
12. **Développement de partenariats entre communauté SdB-énergie et autres acteurs**

Il est souhaitable de développer des interfaces avec différents partenaires :

1. Implication du tissu industriel dans le développement de nouveaux instruments (ruptures nécessaires, contact avec les labos pour définir les limites des instruments) : exemple Bruker, Jéol. Irriguer le secteur privé avec des thématiques à travailler.
2. Implication des Instituts de Transition Energétique (ITE) : participation à l’identification des problématiques SdB et aux actions de recherche SdB en tant que partenaire et/ou co-financeurs.
3. Implication des Institut Carnot, articulation des niveaux de TRL.
4. Coordination des implications/contributions universitaires via la CPU ?
5. Gestionnaires de programmes : ANR (si budget spécifique)  ? ou directement les membres de l’Ancre participant à l’action ?
6. **Domaines clés** (identification des communautés et secteurs d’activité concernés)

Les industries concernées sont très diverses:

1. génie des procédés au sens large
2. nucléaire
3. électrochimie
4. combustion
5. échangeurs thermiques
6. transport (routier, maritime, sous-marin, aérospatial, spatial).
7. métallurgie
8. nanotechnologies
9. …

Les acteurs directement concernées par ces développements sont réparties dans plusieurs communautés scientifiques ; les problématiques physiques concernées sont également très variées :

1. catalyse hétérogène, électrocatalyse, photoélectrocatalyse : besoin d’orienter la sélectivité réactionnelle, d’accroitre les cinétiques et l’efficacité énergétique.
2. vieillissement/corrosion/protection des matériaux et structures
   * Nécessité de comprendre les processus microscopiques (mécanismes de vieillissement/dégradation) dans des milieux et des conditions opératoires très diverses
   * Besoins de développer des stratégies de lutte contre ces phénomènes.
3. milieux poreux, percolation de milieux multiphasés
   * Besoins en élaboration, caractérisation, mesure et optimisation de propriétés (transport sélectif, etc.).
   * Besoin de la maîtrise d’architectures 3D.
4. nano-objets, nanostructures
5. caractérisation de systèmes hydratés - gels nano-poreux
6. fluides et processus complexes
7. alliages
8. matériaux critiques et exotiques
9. colloïdes
10. mouillabilité (surfaces et interfaces)
11. différents types d’interfaces (gaz-surface, fluide-fluide ou fluide-solide)
12. échanges de chaleur