

# Feuille de route Sciences de base pour l'Énergie

*Matériaux pour l'Énergie :  
de la structure à la fonctionnalité*



Alliance Nationale de coordination de la Recherche pour l'Énergie

## Sciences de base pour l'Énergie : Matériaux pour l'Énergie : de la structure à la fonctionnalité

La transition énergétique et de manière générale les problèmes environnementaux liés au réchauffement climatique nécessitent d'importants efforts de recherches pour découvrir et développer de nouveaux matériaux aux propriétés en rupture. Le paysage énergétique est en pleine mutation entraînant d'importantes évolutions dans les industries matures basées sur les hydrocarbures et surtout nécessite le développement de nouvelles sources, de vecteurs alternatifs et de convertisseurs dédiés d'énergie dont le déploiement à grande échelle est souvent limité par les performances des matériaux.

Le mix énergétique bas carbone du futur sera multiforme en intégrant les énergies hydroélectrique, marine (courants/marées, « blue Energy »), éolienne, solaire, géothermique et nucléaire (dans une mesure restant à déterminer), ainsi que les énergies diffuses ou faibles mettant en jeu des matériaux piézo/triboélectriques, des aimants permanents, des MEMS/NEMS (micro/nano « ElectroMechanical Systems ») ou encore des semiconducteurs. Le stockage électrochimique et la production d'hydrogène par électrolyse et son stockage, particulièrement importants dans le domaine des énergies alternatives aux moteurs thermiques, connaissent aujourd'hui de forts développements rendus possibles par la découverte de matériaux aux caractéristiques innovantes. Mais tous les grands domaines de l'énergie nécessitent la mise au point de matériaux innovants à forte potentialité. Pour des raisons évidentes d'éco-compatibilité, les procédés de production d'énergie doivent être associés à des procédés de séparation, purification et traitement des effluents, à des études de recyclage et de traitement des déchets ultimes, et à l'analyse de cycle de vie. Ainsi, pour conférer à ces procédés les caractéristiques inhérentes au développement durable, les matériaux intégrés dans ces nouvelles technologies de l'énergie doivent eux-mêmes être vertueux : non-stratégiques (disponibilité et coût), non écotoxiques, durables et performants.

De même, dans le cadre de la réflexion sur le cycle du carbone, la diversification des sources de carbone (biomasse, plastiques recyclés, déchets, etc.) conduira dans un avenir proche à adapter les procédés et les matériaux de conversion et de reformage à ces nouvelles contraintes (catalyseurs, agents de séparation et d'adsorption, etc.). Par exemple, dans le domaine du raffinage du pétrole, le développement de nouveaux matériaux catalytiques est nécessaire. Il en va de même pour convertir les molécules les plus réfractaires telles que le CO<sub>2</sub> et le CH<sub>4</sub> en produits valorisables au moyen de procédés (éco)-efficients.

A titre d'exemples et de manière non exhaustive, on peut citer les besoins suivants en termes de nouveaux matériaux :

**Production, stockage et conversion de l'énergie** : dans les domaines des cellules solaires photovoltaïques, des batteries, des piles à combustible et des électrolyseurs, la conversion photonique, l'électrochimie, l'électrocatalyse et la photocatalyse impliquent des enjeux « matériaux » cruciaux notamment pour des problématiques de durabilité et de coût (semi-conducteurs, oxydes et polymères pour le photovoltaïque, matériaux d'électrodes et électrolytes des batteries, piles à combustible et électrolyseurs, plaques bipolaires, etc.). Les technologies de récupération ou stockage de chaleur (ex. géothermie) pourraient également tirer bénéfice du développement de nouveaux matériaux à conductivité et capacité thermiques améliorées (ex : des nano-fluides) ou résistants à la corrosion.

**Les besoins en nouveaux catalyseurs dans le cycle du carbone** : qu'il s'agisse de la production de carburants et d'hydrogène ou de la conversion de méthane et de dioxyde de carbone en produits valorisables, les besoins en catalyseurs sont dictés par la nécessité de tirer la meilleure utilisation de chaque atome de carbone, ce qui nécessite de développer des matériaux catalytiques permettant d'obtenir une **sélectivité élevée** de réaction. Bien sûr cela ne doit pas être obtenu au détriment des

autres performances que sont l'activité et la stabilité des catalyseurs. Cet objectif est difficile à atteindre en raison de la variabilité de composition et de structure des nouvelles ressources à traiter que sont les flux issus de la biomasse ou du recyclage des matières plastiques.

L'exploitation d'effets encore mal maîtrisés tel que le **confinement** des réactifs et intermédiaires réactionnels, le développement de surface à **site unique** ou **atome unique** pourrait apporter des réponses. Le couplage catalyse/méthodes d'activation non-thermique (catalyse assistée) pourrait ouvrir une voie complémentaire de recherche.

Les travaux dans le domaine de la science des **nanomatériaux** au cours des vingt dernières années ont démontré que le formidable potentiel et la grande versatilité des systèmes nanométriques permettaient d'accéder à de nouvelles propriétés (optiques, électroniques, catalytiques, magnétique, etc.) souvent via le contrôle **des morphologies et textures**. L'accès à des phases métastables aux propriétés originales a été possible grâce à des synthèses sous contrôle cinétique (chimie douce). Le **couplage de phénomènes** permettant notamment de mieux contrôler les **assemblages** à l'échelle mésoscopique de nanoparticules constitue également un axe prometteur (« Evaporation Induced Self Assembly », « Ice Templating », « Polymerisation Induced Self Assembly », etc.). Dorénavant, du fait de leur nature multifonctionnelle de plus en plus marquée, les matériaux devront intégrer des formulations **composites** ou **hybrides complexes** ce qui renforce la nécessité de croiser les disciplines (ex. (bio)polymères, charge inorganique). Dans ce contexte, les propriétés aux **interfaces** sont essentielles et jouent un grand rôle dans la performance finale du système. La découverte de **nouvelles familles de matériaux** (ex graphènes, mxènes, siloxènes, etc.) ouvre de vastes champs d'investigation, d'applications et de développement. Cependant, elle ne doit pas nous faire oublier des **familles de matériaux plus anciens** (ex des alliages Heusler, nitrures, intermétalliques, matériaux lamellaires...) qui pourraient développer des propriétés particulières en les revisitant au moyen des méthodes de synthèse récentes à même de leur conférer des caractéristiques optimisées (état divisé, propriétés de surface, morphologie, assemblage / organisation contrôlée...), ou en les combinant avec d'autres familles de matériaux. **Les matériaux adaptatifs** (« responsive materials ») largement mis à contribution dans la nature sont aussi susceptibles d'offrir de nouvelles opportunités d'amélioration des procédés (ex des hydrogels). Enfin, **la substitution des métaux rares et/ou stratégiques** représente un domaine transverse à de nombreux domaines à des degrés et échelles de temps variables. Cette thématique est particulièrement sensible pour les technologies utilisant des matériaux basés sur les métaux du groupe du platine (exemple des catalyseurs d'électrolyseurs et de pile à combustible), mais d'autres éléments dont la criticité a augmenté récemment sont concernés (cas du cobalt dans les batteries lithium, terres rares, etc.). De nos jours, les travaux de recherches ne peuvent plus faire l'économie des volets **coût**, **durabilité** (cycle de vie), **sûreté** (approvisionnement, disponibilité) et **sécurité** devenus incontournables dans tout projet de recherches à finalité applicative.

Ces nouvelles propriétés et fonctionnalités provenant souvent du contrôle de la texturation et de la structuration à l'échelle nanométrique, les progrès sont intimement liés au développement de nouvelles approches de synthèse permettant d'agencer les atomes à façon. **l'amélioration des techniques** de synthèse existantes (sol-gel, voie colloïdale, voie solvothermale, voie hydrothermale, etc.) ou émergentes (fabrication additive, microfluidique, « Atomic Layer Deposition » -ALD-, plasma, etc.) et leur application à de nouvelles classes de matériaux sont donc des points clés. Parmi les méthodologies susceptibles de conduire à des découvertes, la **bio-inspiration** est un axe à fort potentiel. En effet, la diversité du vivant a permis de développer des solutions pour répondre aux besoins en termes de fonctions telles que citées précédemment et ce avec une optimisation de l'usage des ressources en préférant la complexité à la diversité, à l'image des organismes vivants (ex. des structures multi-échelles diatomées pour les interactions lumière matière). Des méthodes à haut débit associant des simulations *ab initio* (éventuellement appuyées par des simulations multi-échelles et des méthodes issues de l'intelligence artificielle) à la synthèse combinatoire de ces matériaux dédiés et le screening par des méthodes avancées et à haut débit de leurs caractérisations doivent aussi être

développées et utilisées dans l’optique de recherche de nouveaux matériaux à propriétés fonctionnelles spécifiques améliorées (rational design).

**Une recommandation du groupe de travail** consiste donc à aborder les réflexions sous l’angle de la ou des **fonctions** recherchées et non plus uniquement selon la typologie des matériaux. Ainsi **des colloques** pourraient se structurer non pas autour des grandes familles de matériaux ou par application mais par fonction (conductions thermique, électronique, ionique, propriétés magnétique, thermoélectrique, piézoélectrique, transport de matière, adsorption, diffusion sélective, matériaux adaptatifs autoréparables, etc.). Le **couplage de fonctions** dans le cadre d’un matériau multifonctionnel est de nature à générer une nouvelle propriété non additive (concept Yin Yang). Cette transversalité permettrait de mettre en contact les communautés et de porter à la connaissance de chacun les matériaux innovants **et les nouveaux concepts** permettant notamment de faire le lien entre propriété, structure et performance.