



PEPR DIADEM



DIAMS

Conception par intelligence artificielle et données à haut débit d'alliages avancés et de concepts métallurgiques innovants pour applications structurales

Coordonné par :

Alexis DESCHAMPS - Science et Ingénierie des Matériaux et Procédés (SIMAP)

DIAMS

ENJEUX

- **Alliages métalliques pour applications structurales**
 - Au cœur des transitions et tensions sur les ressources
 - Enjeux de durabilité, allègement, recyclabilité
- **Conception d'alliages**
 - N dimensions : composition, procédés
 - Microstructure multi-échelle
 - Conception accélérée : génération de données, modélisation et IA



Crédits: Grenoble INP - Phelma, UGA & Black Sheep Studio

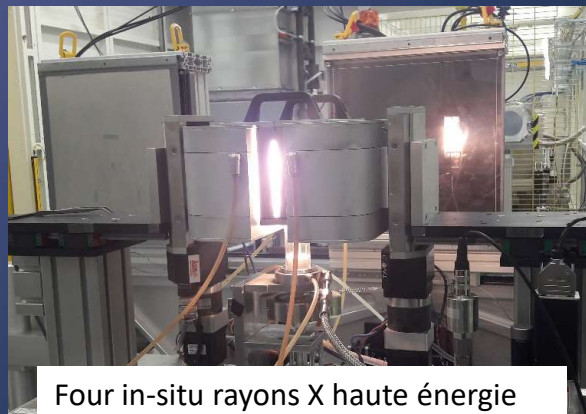
OBJECTIFS

- **Accélérer la génération de données**
 - Criblage de compositions
 - Mesures in-situ et operando
- **Développer et partager les méthodes numériques**
 - Conception assistée par IA ↔ données expérimentales & modélisation
- **Démontrer sur les projets ciblés puis déployer pour la communauté**
 - Plateformes ouvertes à la communauté, structurée par le Réseau National de la Métallurgie et le GDR IAMAT

DIAMS

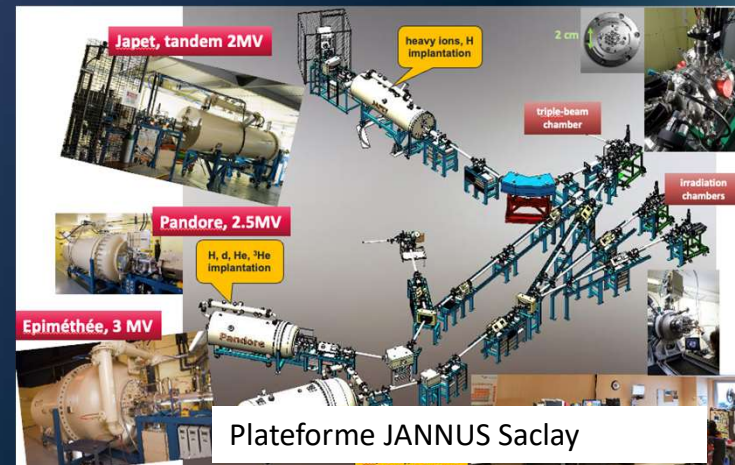
PLATEFORMES: création & évolution

- Criblage par fabrication additive: Samanta CEA, DED Nancy – EBM Grenoble
- Caractérisation haut débit rayons X haute énergie – ESRF & SOLEIL + irradiation JANNUS Saclay



POSITIONNEMENT INTERNATIONAL

- Northwestern-hosted Center for Hierarchical Materials Design / MGI (CHIMAD, USA)
- The Materials Genome Initiative and Advanced Materials (China)
- Rapid Alloy Prototyping Max Planck Düsseldorf (D)

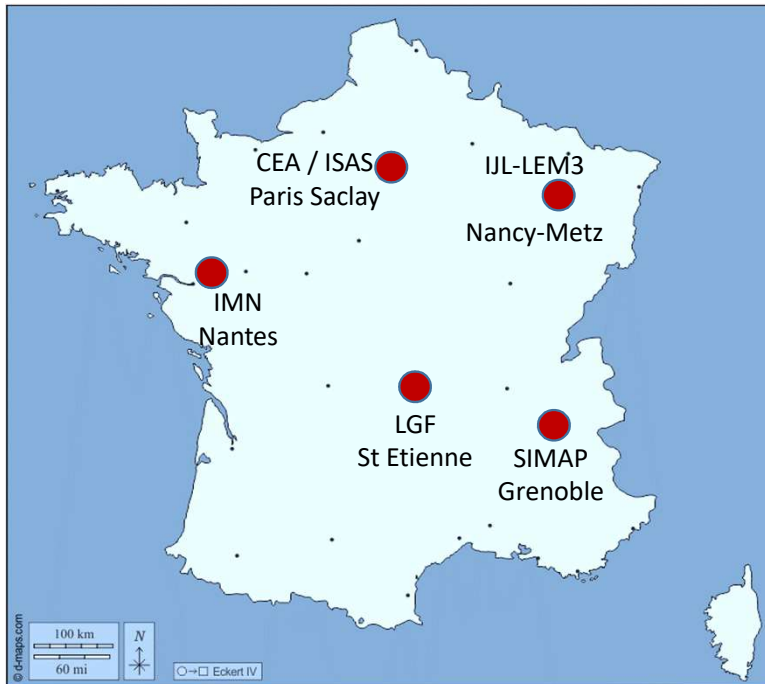


IMPACTS ATTENDUS

- **Alliages à composition complexe en environnement sévère – A-DREAM**
 - Nouvelle approche intégrée de conception numérique validée par l'expérience
 - Alliages améliorés pour utilisation en environnement extrême sels fondus / irradiation
- **Aciers de nouvelle génération pour allègement des structures**
 - Nouvelle méthodologie à haut débit d'évaluation des microstructures associée à la modélisation IA
 - Alliages optimisés en composition & procédés pour un portfolio de propriétés
- **Alliages d'aluminium pour la fabrication additive**
 - Nouvelle méthodologie à haut débit de criblage d'alliages pour la F.A. et d'association de l'IA aux données
 - Développement d'alliages spécifiques pour nouveaux procédés et nouvelles exigences - recyclabilité

DIAMS

LABORATOIRES IMPLIQUES



RH

- **Permanents (90 h.mois)**
 - 16 chercheurs / ens-chercheurs (75 h.m)
 - 4 personnels techniques (15 h.mois)
- **Non-permanents (180 h.mois)**
 - 2 theses (72 h.m)
 - 3 post doc (66 h.m)
 - 3 IR (42 h.m)



PEPR DIADEM



A-DREAM

Développement accéléré de matériaux résistants à la corrosion

Coordonné par :
Fanny Balbaud-Célérier – ISAS CEA

A-DREAM

ENJEUX

- Diminution du coût de la corrosion (~ 3,5% PIB mondial)
- Besoins accrus en matériaux de structure : urgence du changement climatique et transition énergétique
- Nécessité d'accélérer le développement de matériaux à haute performance en terme de durabilité et minimisant les éléments toxiques et critiques

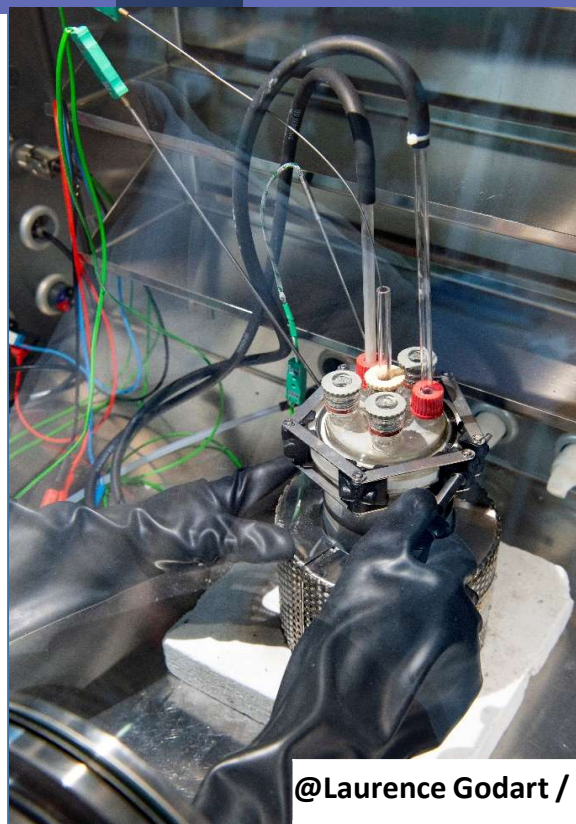
OBJECTIFS

- Accélérer la découverte de matériaux/revêtements résistants à la corrosion $\Rightarrow$ maîtrise de la durabilité et des ressources
- Mise en œuvre d'une approche intégrant :
 - conception numérique des matériaux : IA/modèles de corrosion/approche thermodynamique
 - élaboration haut débit
 - mise en œuvre de tests de corrosion accélérés

A-DREAM

PLATEFORMES

- Plateformes de synthèse de matériaux et revêtements :
 - Synthèse combinatoire de revêtements fins (HiWay2MA_t) et épais et matériaux massifs (DIAMS)
 - Développement d'une plateforme hybride de synthèse de revêtements par voie chimique
- Plateformes de tests de corrosion accélérés :
 - Plateforme d'essais de corrosion pour criblage de compositions
 - Plateforme intégrée de corrosion couplant : électrochimie et techniques analytiques permettant criblage et évaluation du comportement long terme des matériaux



@Laurence Godart / CEA

POSITIONNEMENT INTERNATIONAL

**1 projet identifié
couvrant le même
périmètre :**

**Accelerated Materials
Design for Molten Salt
Technologies Using
Innovative High-
Throughput Methods –
US DOE/ARPA-E project
(Advanced Research
Projects Agency-Energy)**

<https://arpa-e.energy.gov/>

IMPACTS ATTENDUS

- **Démonstration de la capacité à mettre en œuvre une démarche d'accélération de l'identification de matériaux et revêtements résistants à la corrosion dans des milieux agressifs**
- **Développement d'un dispositif d'essais de corrosion accélérés pouvant être utilisé :**
 - En milieu sels fondus pour des applications dans le domaine de l'énergie : réacteurs nucléaires, stockage de la chaleur, solaire à concentration.
 - Dans d'autres milieux agressifs : application de la démarche intégrée à d'autres environnements
- **Création d'une communauté de chercheurs en corrosion, science des matériaux, intelligence artificielle et procédés innovants pour permettre l'émergence de matériaux haute performance et durables**

A-DREAM

LABORATOIRES IMPLIQUES



RH

- **Permanents : 44 h.mois chercheurs/enseignant-chercheur + 16 h.mois personnel technique**
- **Non-permanents : 102 h.mois post doctorants + 24 h.mois CDD chercheur**



PEPR DIADEM



FASTNANO

Matériaux à basse dimensionnalité

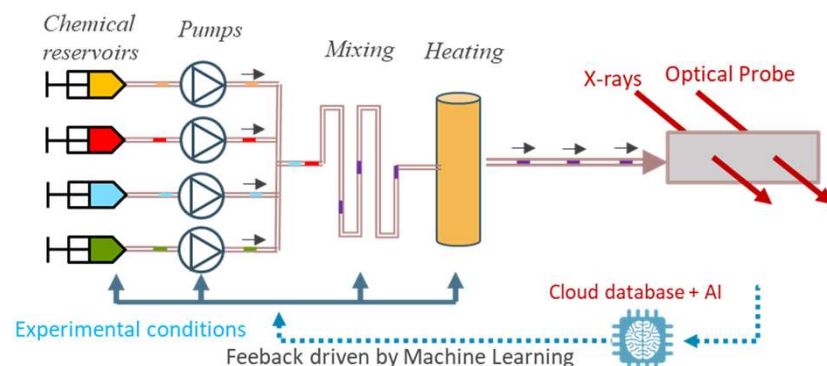
Coordonné par :

Serge Palacin (Yann Leconte) - Nanosciences et
Innovation pour les Matériaux, la Biomédecine et
l'Énergie (NIMBE)

FASTNANO

ENJEUX

- Découverte accélérée de nano-objets 0, 1 et 2D utilisables dans des applications innovantes pour l'énergie (batteries, PAC...), l'environnement (capteurs) et l'électronique

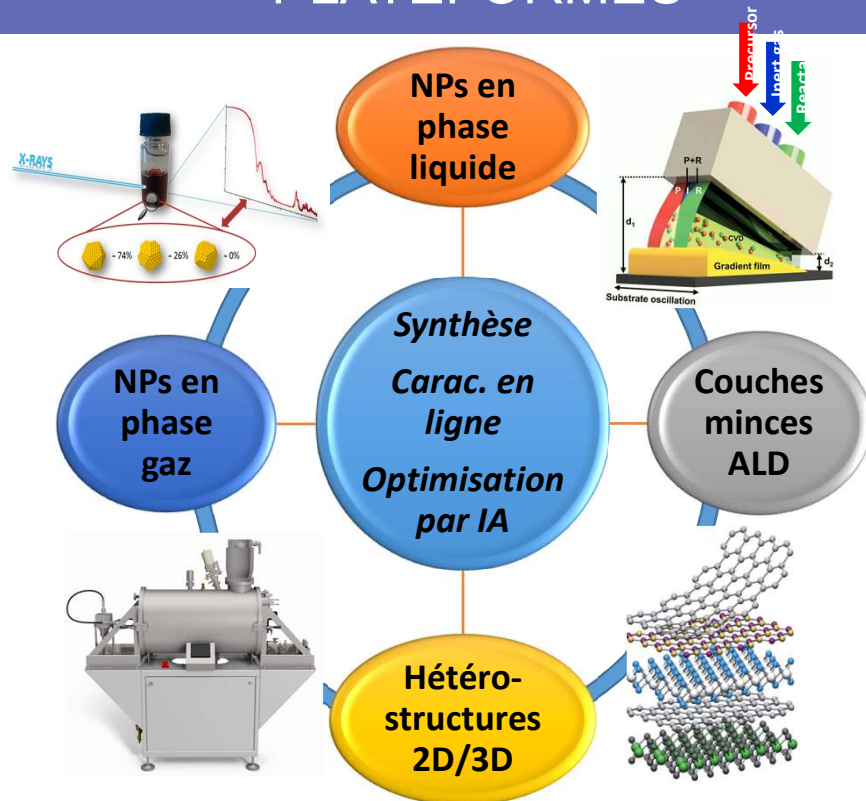


OBJECTIFS

- Réaliser 4 plateformes de synthèse dotées d'outils de caractérisation haut débit en ligne alimentant un traitement des données assisté par IA
- Mise à disposition de ces plateformes pour la communauté scientifique via des AAP dédiés

FASTNANO

PLATEFORMES



Les 4 plateformes de FastNano

POSITIONNEMENT INTERNATIONAL

- La synthèse assistée par IA est en plein essor au niveau mondial, notamment pour le drug design. Mais peu de réalisations à l'échelle nano
- Près de 50 équipes françaises se sont déclarées intéressées par les dispositifs de synthèse nano en phase liquide qui seront développés par FastNano
- Collaborations internes avec 2FAST, Databases&IA, High Throughput Characterization, MOF Learning

IMPACTS ATTENDUS

- **Les principales étapes du projet sont**
 - Couplage de l'analyse LIBS et contrôle du dépôt en phase gaz par IA
 - Montage du réacteur phase liquide en continu et couplage avec le dépôt en spray
 - Synthèse de films d'oxydes mixtes sur le nouveau dispositif SALD et caractérisation assistée par IA
 - Montage du robot de transfert et du suivi optique automatisé pour l'assemblage de flakes 2D
- **Développements potentiels d'applications**

Les nano-objets synthétisés dans le cadre de FastNano trouveront des applications dans les énergies renouvelables (matériaux pour batteries tout solide, électro- et photocatalyse, photovoltaïque...), la santé (marquage biologique, nanomédecine, diagnostique...), l'électronique (diodes MIM, optoélectronique...)

FASTNANO

LABORATOIRES IMPLIQUES



RH

- **Permanents: 103 h.mois**
 - 17 chercheurs, 2 enseignants-chercheurs, 5 ingénieurs de recherche
- **Non-permanents: 144 h.mois**
 - 5 postdocs



PEPR DIADEM



2FAST

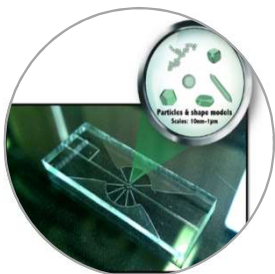
Laboratoire fluide autonome pour le déploiement accéléré des procédés de synthèse de matériaux à propriétés contrôlées

Coordonné par :
Sophie Charton – CEA ISEC

2FAST

ENJEUX

- Miniaturiser et automatiser la synthèse des matériaux en voie liquide
- Caractériser directement leurs propriétés
- Maîtrise des environnements et réduction des coûts, délais, impact environnementaux de la R&D



Exemple d'intégration sur puce de 4 diagnostics optiques adaptés aux solides en suspension (ISEC-LGC-IUSTI)

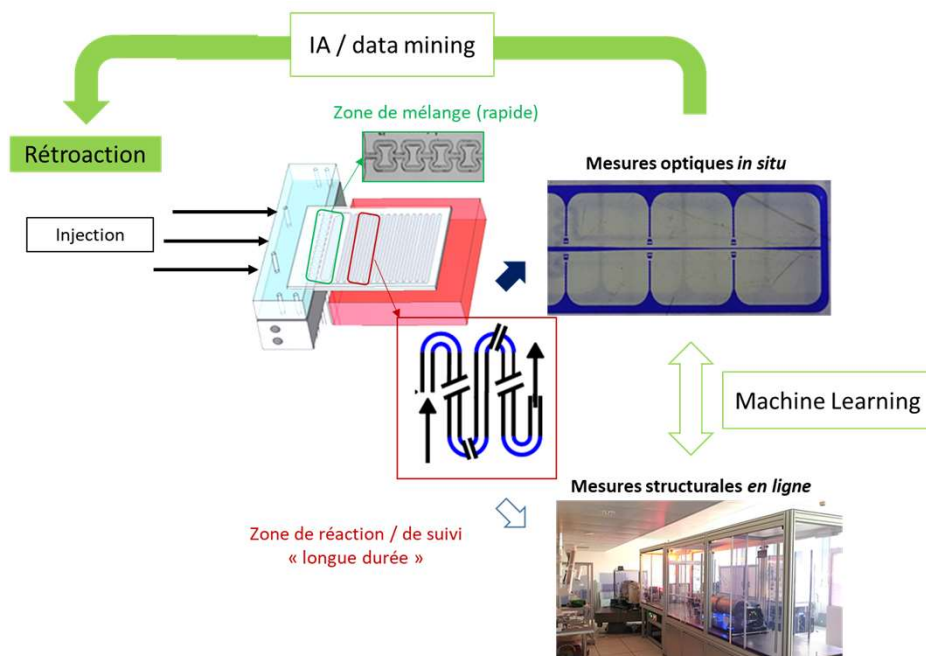
OBJECTIFS

- Démontrer l'apport et le potentiel des laboratoires fluidiques orchestrés sur un panel étendu de matériaux et de conditions de synthèse
- Promouvoir leur essor pour la découverte accélérée de matériaux, grâce à des puces standardisées et une instrumentation embarquée
- Connecter les différentes échelles de caractérisation aux propriétés d'usage pour les modéliser

2FAST

PLATEFORMES

- Mutualisation des outils et savoir-faire



POSITIONNEMENT INTERNATIONAL

- Plateformes robotisées à TRL10 pour la chimie et la pharmacie
 - HTE (Heidelberg)
 - KEBOTIX (USA)
- R&D académique très active sur la synthèse haut-débit/caractérisation des matériaux
 - US / Canada : A. Asparu-Guzik, E. Sargent
 - Europe : G. Ceder, A. Llobera
 - Japon : H. Maeada
- Collaborations potentielles
 - IUSTI (modèles opto-fluidiques)
 - GDR SynthFlu
 - GDR microfluidique

IMPACTS ATTENDUS

- **Milestones du projet (démarrage prévu Nov.-22)**
 - M6 : inventaire détaillé des moyens et expertises et consolidation des interactions en vue des démonstrations
 - Deux démonstrations majeures :
 - rétroaction rapide par analyse UV-Vis (M6) et couplage SAXS (M18) pour la synthèse rapide de nanoparticules de taille et forme contrôlées (interaction avec FASTNano)
 - rétroaction rapide par analyse Raman (M12) et couplages aux caractérisations optiques et SAXS (M18) pour la synthèse en conditions sévères de matériaux minéraux ou hybrides
- **Développements potentiels d'applications**
 - Puces standardisées et interconnectables pour la synthèse, le mélange rapide et l'intégration des diagnostics optiques (analyse chimique et PAT)
 - Modèles (IA) et bases de données pour la corrélation des observables « in situ » aux données résolues (SAXS, WAXS) acquises « en ligne »
 - Plateforme automatisée 3 voies pour la synthèse contrôlée de MOF (avec MOFLearning)

2FAST

LABORATOIRES IMPLIQUES



RH

- **Permanents (12 h.mois)**
 - 13 chercheurs / ens-chercheurs (12 h.m)
- **Non-permanents (90 h.mois)**
 - 2 post doc (24 h.m)
 - 4 IR (66 h.m)



PEPR DIADEM



HIWAY-2-MAT

Méthodes d'exploration haut-débit autonome et combinatoire en chimie du solide

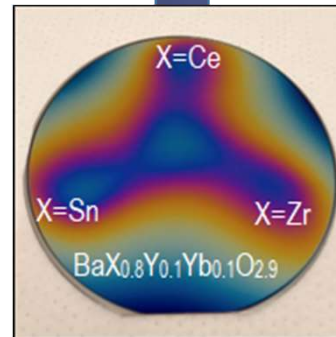
Coordonné par :

Guilhem Dezanneau Structures, Propriétés et
Modélisation des Solides (SPMS)

HIWAY-2-MAT

ENJEUX

- Accélérer l'exploration de nouvelles (ou anciennes) compositions
- Développer une connaissance statistiquement consolidée des relations composition-propriétés
- Introduire les outils de l'industrie 4.0 dans la recherche en matériaux



OBJECTIFS

- Créer de nouveaux outils de recherche
- Balayer un grand nombre de compositions pour les:
 - Capteurs intelligents
 - Matériaux pour dispositifs électroniques
 - Matériaux luminescents
 - Fenêtres intelligentes

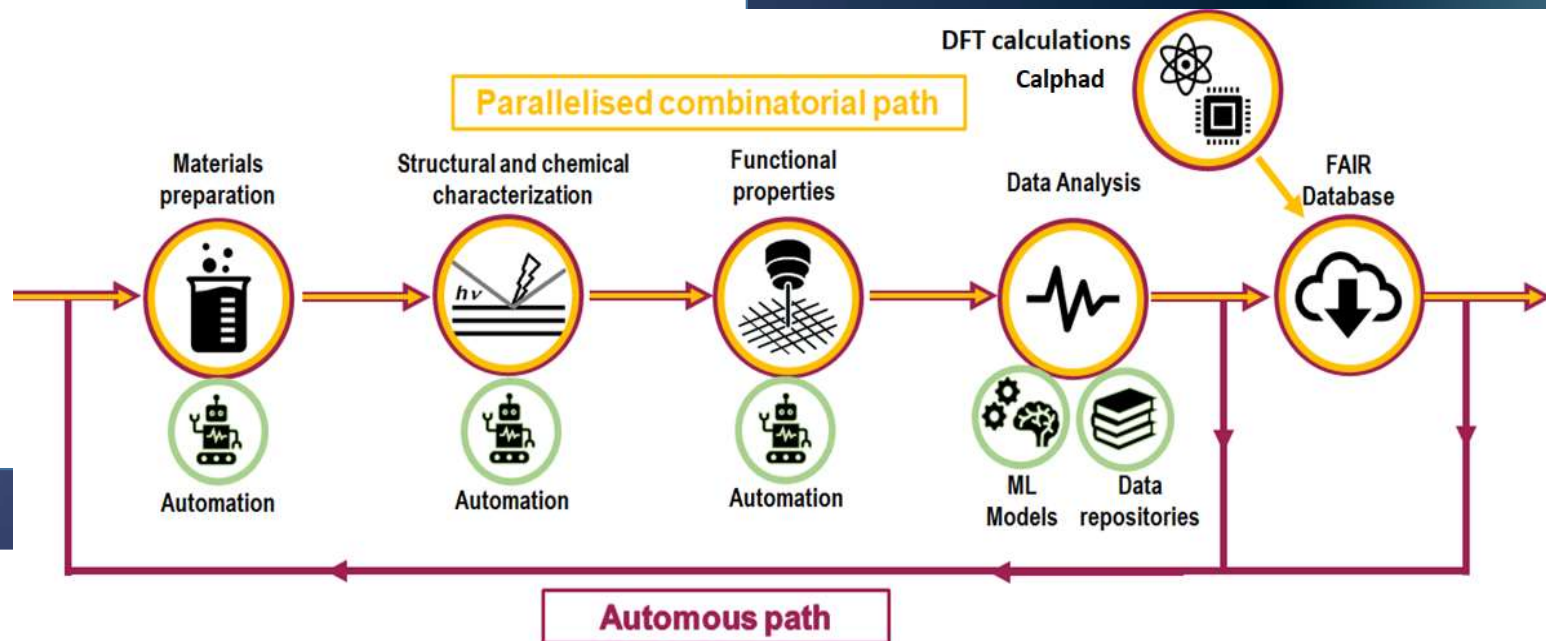
HIWAY-2-MAT

PLATFORMES: création & évolution

- Chemin consolidé de dépôt combinatoire de couches minces et d'analyse de leurs propriétés
- Plateformes de recherche autonomes

POSITIONNEMENT INTERNATIONAL

- Projets similaires: Univ. Liverpool
- Collaborations: A. Tarancon (IREC/ Spain), H. Stein (Germany)



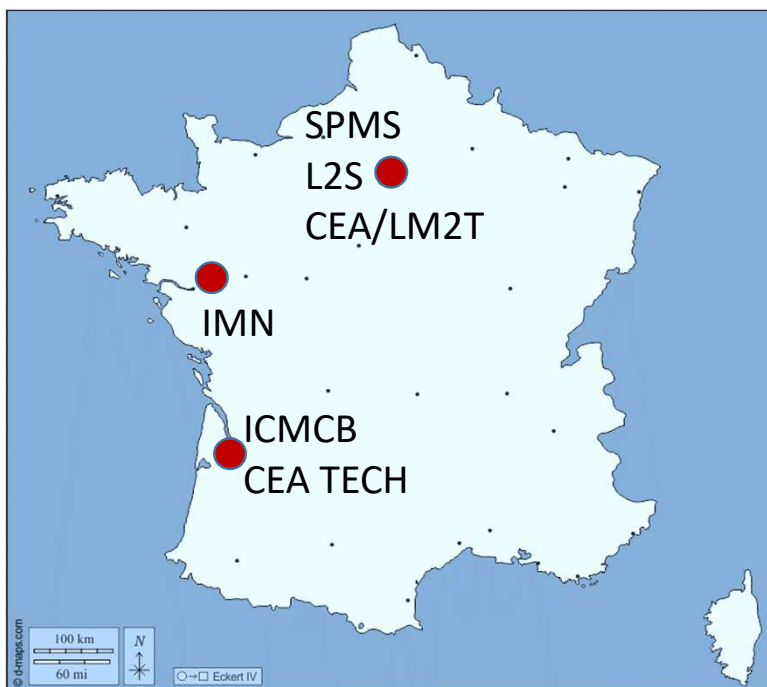
HIWAY-2-MAT

IMPACTS ATTENDUS

- Développement d'outils spécifiques pour la recherche haut-débit en sciences des matériaux: synthèse, caractérisation des propriétés structurales et physiques
- Mise en place de deux plateformes de recherche autonome, modulables et adaptables à différentes applications
- Production d'un flux de connaissances beaucoup plus large qui aidera à comprendre plus profondément les relations composition-structure-propriétés.

HIWAY-2-MAT

LABORATOIRES IMPLIQUES



RH

- **17 Permanents (68.5 Hommes.Mois)**
 - 10 chercheurs
 - 7 ingénieurs
- **7 Non-permanents (84 homme.mois)**
 - 7 post-docs
- Compétences variées allant de la synthèse des matériaux, à l'étude de leurs propriétés, en passant par la modélisation et le design d'automates et l'optimisation de procédés.



PEPR DIADEM



RUBIS

Développement et fabrication de céramiques et de composites thermo-structuraux pilotés par les données: plateforme de Recherche sur l'Usine du Futur, le Big data, l'Intelligence Artificielle et les Systèmes d'Information associés

Coordonné par :

Fabrice Rossignol

Institut de Recherche sur les Céramiques (IRCER)

RUBIS

ENJEUX

- **Volet Matériaux (composites)**
 - Consolidation des approches “*materials by design*”
 - Jumeaux numériques “Matériaux”
- **Volet Procédés (céramiques)**
 - Usine du futur et industrie 4.0 : mise en forme et traitement thermique
 - Jumeaux numériques “Procédés”

OBJECTIFS

- Calcul de structures virtuelles réalistes (Echelles micro/méso)
- Augmenter la robustesse des procédés de fabrication
- Améliorer la tolérance aux défauts des pièces



RUBIS

PLATEFORMES



Modélisation/simulation des matériaux/procédés
Synthèse haut débit et mise en forme 1D, 2D, 3D, 4D

POSITIONNEMENT INTERNATIONAL

Projets similaires

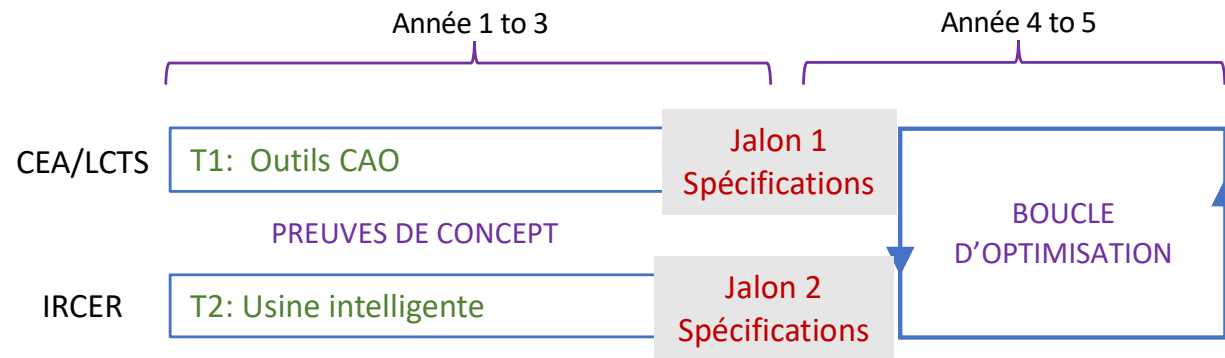
- Réseau MAPP (Materials and Advanced Powder Processes) de l'EPSRC (UK)
- Réseau des Fraunhofers (D)
- Réseau FAIRmat (D)
- Univ. Stuttgart (D) - Arena2036 ...

Collaborations potentielles

- Discussions déjà engagées avec le Fraunhofer IKTS – Dresde (D)

IMPACTS ATTENDUS

• Jalons



• Livrables

Modélisation/simulation des matériaux/procédés
L1: Plateforme Outils CAO / DIADEME

L2: Plateforme Usine intelligente / DIADEME
 Synthèse haut débit et mise en forme 1D, 2D, 3D, 4D

RUBIS

LABORATOIRES IMPLIQUES



RH

- **Permanents**

27,8 p.m au total

Numériciens, chimistes et physiciens des matériaux, rhéologues, spécialistes commande numérique...

- **Non-permanents**

108 p.m au total

Les non-permanents recrutés sur RUBIS auront des profils de "data scientists"



PEPR DIADEM



LIBELUL

LIBS for ELemental high throughpUt anaLysis

La LIBS pour des analyses élémentaires à haut débit

Coordonné par :

Christophe Dujardin – Université Lyon1 & CNRS - ILM

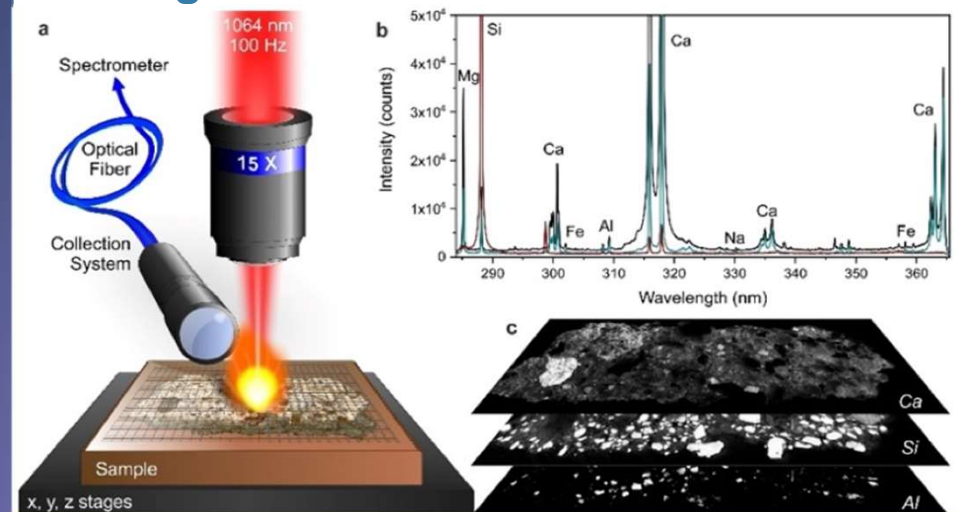
LIBELUL

ENJEUX TECHNOLOGIQUES

- Rapidité d'analyse (20Hz in-situ / sur site ou kHz en imagerie plateforme)
- Compacité / Mobilité (sur site)
- Sensibilité et complexité (1 – 100 ppm selon les éléments)
- Versatilité vis à vis des matériaux
- Multi-modalité (LIBS 2D-3D / Optique / Raman / fluorescence...)
- Quantitatif (références)

OBJECTIFS

- Mise en place de 2 outils d'analyse:
 - LIBS mobile haute performance
 - Imagerie LIBS multimodale haut débit

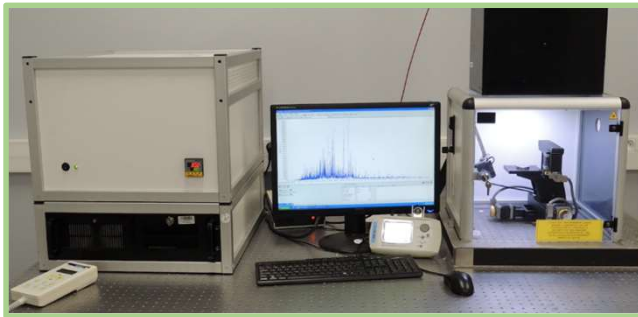


LIBELUL

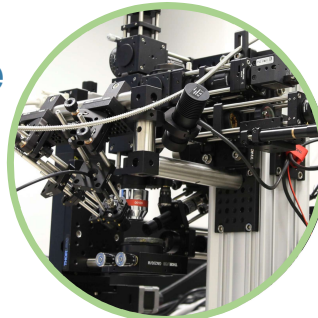
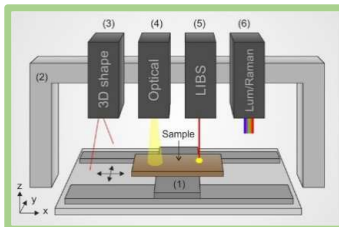
PLATEFORMES

La LIBS pour le développement matériaux

- La LIBS vers l'échantillon



- L'échantillon
vers la LIBS multimodale



POSITIONNEMENT INTERNATIONAL



Projets similaires

- Pas de projets multimodal connus
- ELEMISSION (Canada), LIBS Géologie orienté carottes minières

Collaborations potentielles

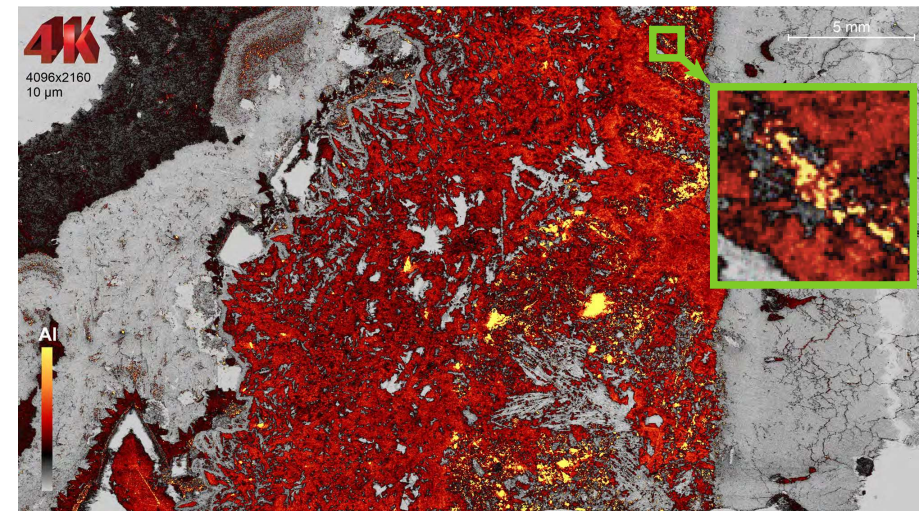
- dans DIADEM (DIAMS, Hiway-2-Mat, FASTNANO ...et avec la plateforme data/simu)
- et Géologie (Nancy, Chili), Archéo. (ArAr, C2RMF), Cristaux ultra-purs (ILM), Biomédical (IAB, CHUGA)

IMPACTS ATTENDUS

Jalons du projet:

- **Plateforme Imagerie multimodale**
 - T0+18: Plateforme LIBS Multimodale développement modules séparés
 - T18 + 18: intégration + développements AI pour analyse “rapide” puis ouverture aux autres projets
 - Cible: 10x20 cm² @ 30 µm: 22 M-spectres (100 Hz: 60h vs 1kHz : 6h)
- **Plateforme mobile LIBS: adaptable et mobile pour analyse quantitative**
 - T24: développement et validation performances
 - T24+12: campagnes sur site
 - Ouverture vers les autres projets

8,8 millions de spectres @ 1kHz: 2h30



Au-delà de DIADEM

Impact en géologie, bio-imaging, catalyse

LIBELUL

LABORATOIRES IMPLIQUES



RH

- **Permanents (27 Hm)**
 - 5 chercheurs (17 Hm)
 - 1 ingénieur (4 Hm)
 - 1 technicien (6 Hm)
- **Non-permanents (24 Hm)**
 - 1 post doc