

Innovation technologique Liliane Bettencourt

M. Yves BRÉCHET, membre de l'Institut
(Académie des sciences),
professeur à l'Institut national polytechnique de Grenoble,
haut-commissaire à l'Énergie atomique,
professeur invité sur chaire annuelle

« *MATERIALS BY DESIGN* » : MULTI-MATÉRIAUX MULTIFONCTIONNELS ARCHITECTURÉS

Contexte scientifique : La science des matériaux comme vecteur d'innovation

La science des matériaux est emblématique des « sciences de l'ingénieur » : indispensable pour réaliser des objets industriels et à la base de la plupart des innovations technologiques, elle nécessite un investissement au niveau de la compréhension des phénomènes qui en fait une discipline à part entière, construite à l'interface entre la physique, la mécanique, la chimie, et plus récemment, la biologie. Ce statut, à la fois pluridisciplinaire et intermédiaire entre le fondamental et l'applicatif, lui donne un rôle tout particulier dans l'innovation technologique, soit qu'elle la rende possible (comme dans le développement de la microélectronique et des fibres optiques) soit qu'elle constitue un verrou majeur (comme pour les réacteurs de 4^e génération ou le projet ITER). Elle est aussi un lieu d'interaction forte entre l'industrie et le monde académique, aussi bien au niveau de la formation (initiale et par la recherche), qu'au niveau des projets de recherche à vocation applicative.

Toutefois, si elle est identifiée depuis longtemps comme une pièce maîtresse dans le développement des secteurs industriels clés comme le transport, la communication, l'énergie durable ou la santé, la discipline « science des matériaux » a connu dans les dix dernières années une profonde évolution, aussi bien du point de vue expérimental que du point de vue théorique. Après l'utilisation du matériau « de rencontre », l'optimisation des différentes familles de matériaux, puis la sélection raisonnée entre plusieurs familles de matériaux, s'est ouverte l'ère de la *conception des matériaux sur mesure*. Cette évolution historique s'accompagne d'une recherche accrue de la multifonctionnalité et d'un rôle majeur accordé à la modélisation dans la conception et la maîtrise des matériaux. Cette évolution fondamentale façonne le paysage de la discipline, à la fois du point de vue des domaines applicatifs et du point de vue des questionnements fondamentaux.

C'est autour du concept de « conception des matériaux sur mesure » que se sont articulés le cours et les séminaires dans le cadre de la chaire d'Innovation technologique. Celui-ci dépasse largement les frontières traditionnelles entre les matériaux dits « fonctionnels » et les matériaux « de structure » et prend en partie ses racines dans la compréhension des mécanismes aux échelles intermédiaires, comme une étape indispensable non seulement à la compréhension des comportements à l'échelle « macroscopique », mais encore comme une stratégie performante pour développer des matériaux répondant au mieux à des cahiers des charges souvent très difficiles, contradictoires (ou peu compatibles) et extrêmement variés.

En général, la conception des matériaux sur mesure est considérée comme coûteuse et le risque d'un tel investissement est significatif. L'avenir industriel passe en partie aussi par le développement de procédés innovants qui permettront de diminuer les coûts de production tout en augmentant les rendements. La réduction de l'empreinte écologique fait aussi partie de l'enjeu.

La conception de matériaux « sur mesure » est le passage obligé pour répondre aux nouveaux défis posés par les secteurs dits « de haute-technologie » comme la santé, la (micro)électronique et le domaine des énergies renouvelables, mais aussi par les secteurs plus traditionnels comme la construction, la mécanique ou le textile. C'est enfin la stratégie qui permet de conjuguer le développement à long terme d'une discipline en s'appuyant sur des compétences de fond, et sa réactivité aux besoins formulés aujourd'hui.

Un regard sur l'évolution de la dernière décennie : vers des matériaux sur mesure performants, robustes et durables

On a vu une évolution profonde, tant dans les méthodes que dans les questionnements. Une compréhension et une prise de conscience de cette évolution est nécessaire pour appréhender non pas le détail, mais la vision globale des matériaux. C'est cette évolution qui rend possible l'objectif de « multi-matériaux multifonctionnels architecturés sur mesure » qui est l'épine dorsale du cours professé cette année.

Évolution dans les méthodes

Du point de vue expérimental, le développement de méthodes de caractérisation telles que les méthodes de champ proche, la mise en œuvre de techniques expérimentales efficaces à l'échelle atomique comme la sonde atomique tomographique 3D, l'utilisation systématique des grands instruments, avec de plus en plus souvent des études *in situ* permettant non seulement d'analyser les structures et microstructures mais aussi d'étudier leur dynamique et leur évolution sous sollicitations externes, ont profondément modifié notre connaissance des matériaux. Dans cette gamme de techniques expérimentales nouvelles, il faut signaler aussi l'émergence d'outils permettant de localiser l'information au sein d'un objet (par micro-prélèvement d'échantillons) ou au sein d'un comportement global.

Du point de vue théorique, les concepts majeurs de la science des matériaux (défauts, diffusion, interfaces, structures électroniques...) sont cinquantennaires. En revanche, on a vu émerger dans la décennie qui vient de s'écouler des techniques

de plus en plus fiables de simulation des interactions au niveau atomique (*via* les calculs dits « *ab initio* »). On a vu se mettre en place des méthodes de simulation du transport de matière et des transformations de phase de plus en plus réalistes. Les méthodes de simulation des comportements collectifs (de dislocations, de joints de grains) ont bénéficié à la fois des connaissances accumulées et de la puissance accrue des ordinateurs. Les chaînages des différentes techniques de simulation ont vu l'émergence de techniques dites « multi-échelles » permettant de se rapprocher de l'objectif de la métallurgie physique qui est d'expliquer les comportements macroscopiques à partir de mécanismes élémentaires.

Évolution dans les questionnements

Traditionnellement, la *science des matériaux fondamentale* s'intéressait aux mécanismes (transformations de phases, corrosion, plasticité,...) et la *science des matériaux appliquée* essayait d'avoir une vue globale des problèmes, le plus souvent en se contentant d'une approche phénoménologique. De nos jours, cette dichotomie tend à s'estomper et l'innovation se construit de plus en plus sur les questionnements de la science des matériaux fondamentale, au cœur des problématiques industrielles.

La compréhension des évolutions structurales et microstructurales et des relations (structures-microstructures)/mécanismes/propriétés est rarement liée à un seul mécanisme élémentaire et on a vu se développer une science des matériaux (fondamentale) des situations complexes : couplage entre phénomènes, compétition entre réactions, couplage mécanique/magnétique, couplage chimie/électrochimie etc. Parallèlement, les exigences industrielles du développement de matériaux « sur mesure » contraignent à s'éloigner des démarches phénoménologiques et à s'appuyer de plus en plus sur les modélisations à base physique qui intègrent l'ensemble d'un procédé (de solidification ou de croissance, de mise en forme, de mise en œuvre), l'ensemble d'un système (générateurs électrochimiques).

Les questionnements ont aussi évolué de par les exigences accrues portant sur les cahiers des charges applicatifs : la durabilité des matériaux, le comportement dans des conditions extrêmes, les capacités d'évaluation de durée de vie résiduelle sont devenus des verrous par rapport au développement de solutions innovantes dans tous les domaines applicatifs, aussi bien dans les micro- et nanotechnologies que dans les applications liées à la production, au transport, au stockage et à l'utilisation efficace de l'énergie, et dans les nouvelles exigences du domaine biomédical.

Le traitement des déchets solides et effluents liquides apparaît de plus en plus comme un questionnement incontournable, à la fois environnemental (dépollution, minimisation des stocks de déchets) et économique, lorsqu'il s'agit par exemple de récupérer et de donner une seconde vie aux éléments constitutifs de ces déchets et en particulier aux métaux qu'ils contiennent, métaux stratégiques pour nombre de secteurs industriels majeurs et dont la maîtrise de ressources durables est un enjeu économique mondial.

Il devient donc d'une importance centrale dans tous ces domaines de maîtriser les interactions des matériaux avec leur environnement, de prédire leur durée de vie et de prévoir leur recyclage, alors que pendant longtemps le souci majeur de la science des matériaux était de contrôler les propriétés par la structure ou la microstructure. Il faut aujourd'hui développer des matériaux à la fois performants, robustes et durables. Cette triple exigence est le fil conducteur de la démarche de « *material by design* » qui sous-tend le cours.

Multi-matériaux architecturés

Cette évolution à la fois dans les connaissances fondamentales et dans les exigences sociétales (une utilisation plus efficace de la matière et de l'énergie, de nouvelles exigences comme le vieillissement de la population ou l'importance croissante de la sécurité...) a conduit à demander aux matériaux intégrés dans une structure de remplir plusieurs fonctions (multifonctionnalité) et à prendre confiance dans les méthodes de modélisation pour concevoir « *a priori* sur mesure » ces matériaux. Cela nécessite souvent de faire coexister plusieurs classes de matériaux (multi-matériaux) et de leur donner un arrangement qui est tout sauf anecdotique (matériaux architecturés) : cette nouvelle stratégie de développement de matériaux plus performants est une tendance forte de la science des matériaux moderne.

Pourquoi les « multi-matériaux architecturés » ? Les exigences des domaines applicatifs en termes de *propriétés de plus en plus multifonctionnelles* et de durabilité pour les futurs matériaux sont très souvent impossibles à satisfaire avec les matériaux traditionnels utilisés de façon conventionnelle. C'est particulièrement vrai pour des domaines aussi variés que l'allègement dans le transport, l'isolation dans le bâtiment, les micro- et nanotechnologies, le domaine médical, le développement des nouvelles générations de centrales nucléaires ou les nouvelles sources d'énergie. Il n'est pas pour autant toujours nécessaire de développer des matériaux totalement nouveaux du point de vue de leur composition chimique pour satisfaire ces exigences. Un moyen de relever les défis posés réside dans l'élaboration de *multi-matériaux* pouvant associer différentes classes de matériaux (polymères, métaux et céramiques) en s'attachant à optimiser leurs *architectures* à des échelles variées. L'échelle caractéristique de l'architecture d'un matériau ou d'un multi matériau va ainsi se situer entre l'échelle de la microstructure et celle du composant. En fonction des applications, les dimensions du composant (ou de la structure) peuvent varier de quelques dizaines de nanomètres à plusieurs mètres. Ses performances vont alors résulter des interactions entre ces différentes échelles et l'optimisation des propriétés va passer entre autres par une maîtrise de son architecture. Un tel contexte requiert de redéfinir les paramètres pertinents permettant de prévoir le comportement d'un composant donné et de « revisiter » des notions telles que celle de « défaut ». De même, lorsque les échelles de la structure (ou du composant) et de l'architecture se rejoignent, les approches de type « continu » peuvent trouver leurs limites. Ce constat montre la nécessité, en l'espèce, d'une synergie forte entre les différentes composantes de la science des matériaux que sont la physique, la chimie et la mécanique. Il souligne aussi l'absolue nécessité de penser également ces matériaux en termes de génie de l'élaboration.

On peut citer comme exemples actuels de multi-matériaux architecturés les stratifiés multicouches, les matériaux tissés, les matériaux à gradient, les matériaux alvéolaires, les matériaux autobloquants, les laines, les matériaux poreux, les électro-catalyseurs autosupportés...

La stratégie consistant à associer différentes classes de matériaux et diverses architectures est ainsi particulièrement adaptée pour le développement de *matériaux sur mesure* conçus en vue d'un cahier des charges prescrit. Elle est potentiellement riche d'innovations dont la mise en œuvre industrielle est facilitée par les connaissances acquises.

Les matériaux à l'école du vivant : un nouveau paradigme pour la science des matériaux ?

Un aspect qui a fondamentalement transformé le paysage scientifique des dernières années est le développement impressionnant de la biologie. Les conséquences de ce développement sur la science des matériaux sont encore très largement à venir mais il existe au moins deux secteurs où l'on voit apparaître une problématique scientifique qui lie très étroitement les sciences des matériaux et les sciences du vivant. Il s'agit d'une part de la maîtrise de l'interface matière-vivant (question cruciale pour les problèmes d'ingénierie tissulaire ou les problèmes d'adhésion et de motilité cellulaire). D'autre part, les matériaux naturels (le bois, les os) sont, par leur structure même, des multi-matériaux architecturés adaptatifs et auto-guérisants : la stratégie du « biomimétisme structural » bien compris (c'est-à-dire de l'identification des mécanismes gouvernant les matériaux naturels pour en extraire les concepts permettant de créer des matériaux nouveaux) nécessite un effort de longue haleine donnant lieu à des recherches à l'interface entre la biologie et la science des matériaux. Il est important de constater à ce niveau que, culturellement, ces deux disciplines ont en commun de traiter des objets complexes (ce qui impose à la modélisation d'être simple) et de s'appuyer sur la compréhension des mécanismes aux petites échelles pour comprendre les réponses au niveau de l'objet. Il est important de développer cette interface pluridisciplinaire et les multi-matériaux architecturés sont une thématique idéale pour le faire, aussi bien pour la formation que pour la recherche.

Le biomimétisme est un champ de recherche déjà bien exploré par le domaine de la « chimie douce », dans lequel, en s'inspirant de la biominéralisation, les chimistes ont développé des procédés de fabrication des matériaux suivant des techniques d'auto-assemblage proche de ce que fait la nature. Malgré ces indéniables succès, cette stratégie que l'on pourrait qualifier de « *bottom up* » peut difficilement fournir de grandes quantités de matériaux, et des applications structurales lui sont difficilement accessibles. En s'inspirant des architectures naturelles (multi-architecturées) et en utilisant des procédés « *top-down* » comme les revêtements, les traitements de diffusion, le co-tréfilage ou le co-laminage, on peut espérer développer des matériaux « bio-inspirés » bénéficiant à la fois de la richesse des architectures et de toute la variété des matériaux disponibles pour l'ingénieur. Cette stratégie est encore très peu explorée.

Quelques pistes de prospective

La capacité de répondre à des besoins applicatifs exprimés sans pour autant oublier le développement de compétences fondamentales est un aspect essentiel de notre démarche. L'objectif est de développer une science des matériaux forte qui puisse contribuer efficacement à des projets applicatifs innovants, précisément parce qu'elle n'est pas morcelée, fragmentée, diluée en une multitude de tâches ancillaires dont elle n'aurait pas la maîtrise. Notre conviction est que les « programmes applicatifs » – et la capacité de la communauté scientifique qui se reconnaît dans la science des matériaux à y répondre efficacement – nécessitent une réflexion de fond sur ce qu'est la discipline, réflexion incompatible avec une vision consumériste de son action. Un matériau est de la matière avec une fonction. On mesure la pertinence d'une recherche en science des matériaux à sa capacité à

extraire des problématiques applicatives les questions fondamentales sous-jacentes et à appliquer à ces problèmes applicatifs les compétences fondamentales développées au cours des années.

L'approche « en surface », qui reflète une vision bien pauvre de la discipline comme ayant simplement une fonction ancillaire d'autres domaines, consiste à raisonner en termes de matériaux envisagés *pour* telle ou telle classe d'application (l'énergie, le biomédical, les micro- et nano-technologies, les communications – pour s'en tenir aux préférées des journalistes...). C'est une vision stérilisante de la discipline, qui ne perçoit pas sa dynamique propre. Il est beaucoup plus instructif de réfléchir aux tendances profondes, qu'elles soient motivées par le questionnement scientifique lui-même ou par les tendances fortes des domaines applicatifs. C'est en procédant ainsi que les différents secteurs applicatifs affichés peuvent pleinement bénéficier de la dynamique de la discipline et que la science des matériaux peut contribuer de façon déterminante à l'innovation technologique.

Les tendances longues des secteurs applicatifs

Dans tous les secteurs applicatifs, on assiste à une exigence croissante des conditions de fonctionnement, associées à une demande de durabilité et de sûreté. Les exigences industrielles conduisent d'autre part à associer à un composant des fonctions multiples qu'un seul matériau ne peut assurer. La compétition entre les différents matériaux rend de plus en plus indispensable un outil de recherche qui aide à concevoir le matériau avant de le réaliser, et cet outil doit de plus en plus intégrer toute une chaîne de procédés.

Les questions scientifiques de fond

Ces tendances des domaines applicatifs que l'on peut retrouver aussi bien dans l'ingénierie nucléaire, dans l'automobile, dans l'aviation, que dans le biomédical, nécessitent bien sûr un effort accru dans les secteurs classiques de la science des matériaux (transformations de phase, plasticité et rupture...). La métallurgie physique, à tort considérée comme une discipline « vieillotte » est en fait une école de méthodes, une source de concepts pour toute la science des matériaux. Dans ces secteurs, il faudra très probablement revenir à des systèmes modèles pour répondre aux questions fondamentales qui sont devenues aujourd'hui « bloquantes » dans une optique de type « *material by design* ».

Mais les questions soulevées par ces problématiques « génériques » vont stimuler des recherches fondamentales en science des matériaux et en génie des procédés dans des domaines encore très largement dominés par l'empirisme.

- La question de la durabilité va conduire à revisiter non seulement la question classique du fluage ou de la fatigue, mais aussi les questions de l'oxydation, de la corrosion, de l'usure, en centrant l'approche sur le rôle de la microstructure. On sera aussi probablement amené à revisiter la physique des contrôles non destructifs.

- Un aspect particulier de la durabilité, la tenue à l'irradiation, exige de développer des techniques de simulation allant de l'échelle atomique (où se produit le dommage) à l'échelle macroscopique (où on en voit les conséquences). Cela est connu de longue date. On peut penser que la nécessité de calibrer les modèles devra impliquer en parallèle le développement de micromachines permettant de tester de très petites quantités de matériaux.

- L'émergence des matériaux multifonctionnels, des matériaux hybrides, des multi-matériaux, remet en premier ordre de priorité la compréhension des interfaces entre matériaux distincts (métaux céramiques et métaux polymères). Il y a gros à parier que les approches du type « structures électroniques » sont un passage obligé.

- Une démarche « *alloy design* »¹ ne va pas sans une maîtrise à la fois de la chimie des matériaux et de la variabilité des procédés. Pour ce faire, les approches de type « *ab initio* », aussi bien pour le volume que pour les interfaces, devront être couplées avec des techniques de modélisation de transformations de phase dans des conditions fortement hors équilibre thermodynamique.

- Le développement des procédés d'élaboration et de mise en forme innovants, s'appuyant sur l'acquisition de données fondamentales, en lien avec la modélisation et la simulation numérique des transferts couplés, sera certainement au centre de cette démarche.

Enfin, la science des matériaux n'échappe pas à la tendance à la miniaturisation des systèmes. La transférabilité des concepts, l'applicabilité des méthodes expérimentales classiques vers des matériaux très confinés et/ou de petite taille est une thématique porteuse où se retrouvent les méthodes de simulation numérique et les techniques de champ proche.

Déroulement de l'enseignement : cours, séminaires et « séminaire informel »

Plutôt que de se focaliser sur un des aspects apparaissant dans les réflexions précédentes, le cours a eu pour objectif de montrer les développements actuels de la science des matériaux en tant que discipline scientifique, en utilisant les matériaux architecturés comme fil rouge de la réflexion, et les défis posés par les innovations technologiques comme une motivation constante.

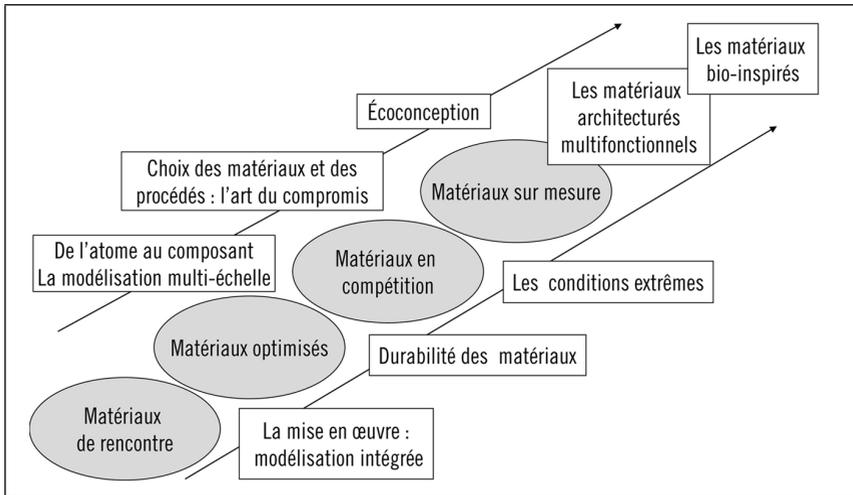
Le parcours proposé a compris :

- la leçon inaugurale qui a « donné le ton » ;
- une série de huit « blocs » associant un cours qui introduisait les idées fondamentales et un séminaire faisant appel à des intervenants extérieurs ;
- des « séminaires informels » (non enregistrés), après chaque séance, permettant de présenter des résultats de recherches en cours sur les thèmes abordés le matin.

Leçon inaugurale. La science des matériaux : du matériau de rencontre au matériau sur mesure

Dans cette leçon inaugurale, on a brossé les grandes évolutions de la science des matériaux, aussi bien du point de vue applicatif que du point de vue fondamental, en insistant sur l'évolution récente qui gomme la distinction classique entre les matériaux structuraux et les matériaux fonctionnels, et qui rapproche la notion de matériau de la notion de structure. Les matériaux architecturés sont emblématiques de cette évolution et en apparaissent comme l'aboutissement naturel. Le schéma ci-dessous illustre l'enchaînement logique du cours à partir de la leçon inaugurale.

1. Démarche consistant à concevoir un alliage, sa composition, ses traitements thermiques, à partir d'une modélisation des relations entre paramètres des procédés et microstructure.



Cours 1 : Les matériaux architecturés multifonctionnels

On a montré comment le concept de « matériaux architecturés » conduit à « remplir l'espace des matériaux » c'est-à-dire à créer des matériaux (au sens généralisé) présentant des combinaisons de propriétés intrinsèquement contradictoires. L'approche de la conception des matériaux architecturés à partir d'une analyse de découplage des fonctions et le rôle particulier de la géométrie des associations de matériaux ont été explicités. Le rôle central de la modélisation dans la conception de tels matériaux a été illustré à partir d'exemples comme les matériaux autobloquants ou les feutres. Nous avons examiné quelques applications pratiques de ces méthodes, comme leur utilisation dans la réalisation de matériaux absorbants acoustiques, de brûleurs catalytiques à faible pollution et d'isolations de réservoirs de fusée. Les séminaires ont apporté d'autres illustrations dans des domaines applicatifs variés (aéronautique, transport, bâtiment...).

Séminaire 1 : Matériaux architecturés, échelles et passerelles

Olivier Bouaziz, Centre de recherche de Arcelor Mittal

Dans l'esprit de la chaire d'innovation technologique, j'ai souhaité que le premier séminaire du cours soit donné par un chercheur issu du monde industriel, afin que le caractère non seulement innovant, mais encore pratique, des idées avancées, soit mis en évidence. Ce séminaire a été consacré à l'application des idées de « matériaux architecturés » avec comme matériau de base les aciers et comme domaine applicatif l'industrie automobile. La force motrice pour ces développements est la lutte contre des matériaux concurrents, et des solutions architecturées impliquent toutes les échelles et conduisent à de nouveaux procédés d'élaboration.

Séminaires informels 1: Exemples de matériaux architecturés

Trois séminaires informels ont montré la pertinence des concepts de matériaux architecturés dans divers domaines :

- L'absorption acoustique dans l'aéronautique (Marc Thomas, ONERA) ;

- La conception optimale de structures *sandwich* multifonctionnelles (Pierre Leite, ONERA) ;
- La conception sur mesure d'absorbants électromagnétiques (Pierre Bollen, Université catholique de Louvain).

Cours 2 : Les méthodes de choix des matériaux et des procédés : état des lieux

On a présenté un état des lieux des méthodes de choix multicritères et les outils informatiques développés au cours des vingt dernières années. On s'est attaché, dans le cours, à faire ce bilan tant du point de vue des méthodes génériques que du point de vue des applications spécifiques. On a montré comment ces approches peuvent être « inversées » pour rechercher une application possible à un matériau donné. On a illustré, dans le cas de sélections couplant fortement les matériaux et les procédés (comme le moulage ou les procédés d'assemblage), le développement de systèmes informatiques de structuration de l'expertise. La question des choix multicritères et de l'utilisation des méthodes de logique floue a aussi été abordée. Le cours s'est terminé sur la sélection de matériaux à haute tenue mécanique et à forte conductivité, exemple qui permet de voir comment les méthodes utilisées pour effectuer des choix peuvent devenir des guides de conception de nouveaux matériaux.

Séminaire 2 : Méthodes de sélection et de conception de matériaux fonctionnels

Stéphane Gorsse, ICMCB, Bordeaux

Partant des critères de conception d'un poêle à bois sans fumée faisant usage de matériaux thermoélectriques, où la question est de sélectionner les meilleurs matériaux existants, on montre que l'équivalent des indices de performance pour les thermoélectriques est une « figure de mérite » que l'on peut maximiser en jouant à la fois sur la composition chimique et sur la microstructure.

Séminaires informels : exemples de développement de matériaux fonctionnels

Alors que les méthodes de sélection des matériaux ont vu le jour pour des applications mécaniques ou thermomécaniques, elles sont maintenant appliquées à des matériaux fonctionnels et servent de guide à la conception des matériaux. Deux séminaires informels ont illustré cette tendance :

- Développement d'alliages à bas coût pour des dispositifs cellulaires à effet magnéto-calorique (Aurore Garrit, Université catholique de Louvain) ;
- Développement de dispositifs à bas coût FeAlV basés sur l'effet thermoélectrique (Camille Van der Rest, Université catholique de Louvain).

Cours 3 : la modélisation multi-échelle des matériaux

La modélisation multi-échelle apparaît dans de très nombreux domaines des sciences de la matière. L'aspect « multi-échelle » est parfois un couplage entre échelles, ou plus souvent un chaînage entre échelles dans lequel le modèle de l'échelle inférieure fournit les données d'entrée du modèle à l'échelle supérieure. Le cours a porté sur les différentes méthodes de simulation numérique, ainsi que sur les vertus des approches analytiques simplifiées, et s'est vu illustré par des

questions fondamentales de métallurgie physique comme l'écrouissage et la précipitation. L'esprit des méthodes de changement d'échelle a été présenté à partir de trois exemples : les structures de solidification, la recristallisation des alliages et les mécanismes d'adhésion cellulaire.

Séminaire 3 : Simulations multi-échelle de la plasticité

Marc Fivel, SIMAP Grenoble

La modélisation multi-échelle de la plasticité cristalline est une des avancées majeures des dix dernières années en science des matériaux. Elle a permis de relier des informations au niveau atomique (simulées par dynamique moléculaire) à des comportements macroscopiques comme la dureté ou la tenue en fatigue. Le développement de la dynamique discrète des dislocations est emblématique du mélange d'empirisme et de rigueur nécessaire pour mener à bien un tel programme. Le séminaire s'est achevé sur les questions qui restent ouvertes et les défis à relever dans ce domaine.

Séminaire informels : exemples de simulations multi-échelle en métallurgie

Deux séminaires ont illustré, dans le domaine de la métallurgie physique, le rôle pivot de la simulation numérique multi-échelle pour comprendre le lien entre des mécanismes à l'échelle atomique (la mobilité des atomes, les dégâts d'irradiation) et leurs conséquences au niveau méso- ou macroscopique (l'évolution de la microstructure et des propriétés résultantes) :

- Méthodes de simulation des transformations de phase en science des matériaux (Emmanuel Clouet, SRMP-CEA-Saclay) ;
- Déformation plastique des matériaux de structure cubique à faces centrées irradiés, apport de la simulation par dynamique des dislocations (Christian Robertson, SRMA-CEA-Saclay).

Cours 4 : Durabilité des matériaux

La question de la durabilité des matériaux est centrale, aussi bien pour l'aéronautique (moteurs aussi bien que cellules) que pour le nucléaire. La question majeure est la fiabilité des essais accélérés et leur utilisation pour prédire la durée de vie des matériaux. Des illustrations ont été proposées dans le domaine du fluage et de l'usure. Les développements récents sur les « matériaux auto-guérisants » ont été exposés au travers d'une analyse phénoménologique de faisabilité.

Séminaire 4 : Couplage mécanique/corrosion

Éric Andrieu, CIRIMAT, Toulouse

De tous les mécanismes de vieillissement des matériaux, la corrosion est sans doute un des plus mal compris. Une des raisons est sans doute le couplage fréquent avec les sollicitations mécaniques. Le séminaire identifie les mécanismes élémentaires à l'œuvre et, *via* quelques expériences simples dans leurs principes, montre les pistes pour une modélisation encore à venir.

Séminaires informels : autour de la corrosion

Le cours a été l'occasion d'un groupe de travail de la communauté des « corrosionnistes » en France, active mais dispersée. L'ensemble des questions

ouvertes en corrosion humide ont été présentées, ainsi que quelques exemples de corrosion sèche ou de tenue à l'irradiation.

- Corrosion sous contrainte assistée par l'irradiation (Benoit Tanguy, SRMA-CEA-Saclay) ;
- Modélisation des évolutions microstructurales à partir de l'échelle atomique (Christophe Domain, EDF-Moret-sur-Loing) ;
- Corrosion des alliages d'aluminium (Christine Blanc, CIRIMAT-Toulouse) ;
- Durabilité des céramiques poreuses, apport des simulations discrètes (David Jauffres, SIMAP_Grenoble-INP) ;
- Fragilisation par l'hydrogène (Xavier Faugeas, LaSIE-La Rochelle) ;
- Endommagement des revêtements d'aubes aéronautiques (Vincent Maurel, CDM-Mines Paris).

Cours 5 : La modélisation intégrée

La modélisation en science des matériaux s'est longtemps attachée, au niveau académique, à comprendre les mécanismes élémentaires. Les situations réalistes dans les domaines industriels font systématiquement apparaître des phénomènes couplés. Le cours montre quelles méthodes permettent de traiter de ces couplages et illustre son propos en montrant des modélisations semi-analytiques des couplages restauration/déformation/recristallisation pour la recristallisation dynamique, des couplages solidification/précipitation pour l'optimisation des traitements thermiques des alliages moulés, des couplages restauration/précipitations/recristallisation pour l'optimisation des gammes de fabrication des aciers micro-alliés.

Séminaire 5 : Modélisation intégrée du soudage par friction/malaxage

Aude Simar, Université catholique de Louvain

Le soudage par friction/malaxage met en œuvre, sans aucun passage par l'état liquide, des déformations intenses et des cycles de température très rapides. La compréhension des propriétés de la soudure obtenue, et par là l'optimisation des paramètres du procédé, passent par une modélisation de la thermique du procédé, des cinétiques de précipitation, des conséquences sur les propriétés locales de plasticité et sur l'endommagement local dans un champ de triaxialité qui dépend des gradients de propriétés de l'éprouvette. La « modélisation intégrée » est pour cet objectif un passage obligé.

Séminaire informel : des traitements thermiques hors du laboratoire

La modélisation intégrée, particulièrement importante pour ce qui est d'optimiser des procédés industriels comme les soudures ou les traitements de surface, nécessite aussi une caractérisation fine de la microstructure. L'utilisation des grands instruments, et en particulier du rayonnement synchrotron, a apporté des avancées majeures dans ce domaine :

- Caractérisation et modélisation intégrée : quelques exemples (Alexis Deschamps, SIMAP-Grenoble).

Cours 6 : Éco-conception et matériaux

Le développement durable impose la prise en compte des impacts environnementaux dans l'usage des matériaux. Le cours a présenté des développements récents de l'école de Cambridge sur cette question en insistant sur la nécessité de considérer les matériaux dans un système, et non pas le matériau de façon isolé. Ce domaine, hautement controversé, nécessite la mise en œuvre d'une méthodologie saine. Celle proposée par M. Ashby (qui a été exposée en détail dans ce cours) a l'avantage d'être directement adaptable à une démarche de conception de produits industriels.

Séminaire 6 : Les problèmes de matériaux dans la gestion thermique des bâtiments

Bernard Yrieix, EDF-Moret-sur-Loing

Ce séminaire a présenté à la fois le contexte des besoins d'isolation dans le bâtiment, les évolutions historiques, les nouvelles voies envisagées pour les « super-isolants » (permettant une meilleure isolation avec une emprise réduite) et la nécessité de considérer des solutions architecturées et une approche « matériaux sur mesure » pour y parvenir.

Séminaires informels : autour de la thermique du bâtiment

Le chauffage du bâtiment constitue un tiers de notre consommation énergétique. C'est dire l'importance de ce secteur dans une approche de type « développement durable ». Le cours a été l'occasion de réunir un groupe de travail autour du thème des « isolants innovants » :

- Propriétés thermiques et mécaniques des mousses (Daniel Quenard, CSTB-Grenoble) ;
- Matrice de mousses polysaccharides pour super-isolation (Cyrielle Rudaz, CEMEF-Sophia Antipolis) ;
- Matériaux architecturés pour les isolants sous vide (Francois Dubelley, CSTB-Grenoble) ;
- Choix de matériaux à changement de phase pour la maîtrise thermique du bâtiment (Juan pablo Arzamendia Lopez, CETHIL-Lyon) ;
- Échangeur intégrant un stockage thermique par chaleur latente (Samer Maaroui, ENSCP-Marne-la-vallée) ;
- Super-isolants thermiques hybrides (Noémie Diascorn, Persée-Mines ParisTech) ;
- Outils 2D et 3D pour guider la conception de matériaux poreux isolants (Geneviève Foray, MATEIS-Lyon) ;
- Propriétés thermiques effectives de réseaux fibreux (Justin Dirrenberger, CDM Mines ParisTech).

Cours 7: Les conditions extrêmes

Dans certaines classes d'applications (les moteurs, les centrales nucléaires, les circuits intégrés), les matériaux sont soumis à des conditions de fonctionnement très exigeantes. Certains cas ont conduit à développer des solutions architecturées (comme les barrières thermiques dans les moteurs d'avion). Dans d'autres situations, on joue exclusivement sur la microstructure. Par ailleurs, même si les conditions de fonctionnement ne sont pas extrêmes, il se peut que les fonctions requises le soient :

extraire la chaleur d'un circuit intégré ou d'un frein de TGV relève de ces situations. Enfin, on peut être amené à développer des matériaux avec des microstructures tellement fines ou tellement contraintes que la stabilité même de ces matériaux devient un défi. Le cours a illustré ces trois classes de problèmes à partir d'exemples issus de besoins industriels.

Séminaire 7 : Le comportement des matériaux sous irradiation

Jean-Paul Massoud EDF-SEPEN Lyon

L'irradiation des matériaux est un traumatisme majeur : elle modifie la structure cristalline en introduisant des défauts de structure, elle modifie éventuellement la chimie par des transmutations et, enfin, elle modifie le transport des atomes par l'introduction de mécanismes balistiques et l'accélération des mécanismes diffusifs classiques. Les conséquences sont à la mesure des dégâts : durcissement, fragilisation, corrosion sous contrainte accélérée. Le séminaire a donné une vue d'ensemble des dégâts provoqués sur les matériaux de structure par une sollicitation extrême dans tous les sens du terme.

Séminaires informels : autour des irradiations

La maîtrise de la fusion fournirait une source d'énergie inépuisable. Au-delà des problèmes spécifiques de physique des plasmas, la réalisation des dispositifs est en soi un défi majeur pour la science des matériaux. On peut dire de même des réacteurs à sel fondu, ou du comportement des cœurs en conditions accidentelles. Le cours sur les conditions extrêmes a été l'occasion de réunir un groupe de travail sur les matériaux pour la fusion et la fission.

- ITER : Composants face aux matériaux (Michel Richou, CEA-Cadarache)
- Matériaux pour le premier mur : conditions d'irradiation (Jean Henry, CEA-Saclay) ;
- Simuler l'irradiation en utilisant des ions (Estelle Meslin, CEA-Saclay) ;
- Comportement à haute température des gaines en Zr (Jean-Christophe Brachet, SRMA-CEA-Saclay) ;
- Les réacteurs à sels fondus : les défis matériaux (Daniel Heuer, LPSC-Grenoble).

Cours 8 : Architectures hiérarchisées : les leçons du vivant

On a proposé dans ce cours un parallèle entre la conception de l'ingénieur et les solutions naturelles. Parce que la nature doit travailler à des températures assez basses, elle est limitée aux matériaux organiques ou relevant de la chimie des solutions. La fascinante variété des matériaux naturels vient de la variété des architectures hiérarchiques naturelles que l'on peut observer dans le bois, les os, les coquillages. Inversement, l'ingénieur a accès à une grande variété de matériaux constitutifs, mais est à ce jour assez peu inventifs sur les architectures. L'association

des deux stratégies, base du biomimétisme structural, peut s'avérer une source de très grandes innovations.

Séminaire 8 : Actuateurs passifs dans les plantes

John Dunlop-MPIKG-Potsdam

Les plantes développent des actuateurs et des senseurs qui sont essentiellement mus par des changements d'humidité de l'air environnant. Le séminaire a montré comment la structure d'enrouement filamenteuse de la cellulose ou l'architecture des cellules du bois peuvent transformer des gonflements hétérogènes en déplacements de grande amplitude. Ont été exposés la fonction de ces actuateurs, leur conception et les leçons que peut en tirer l'ingénieur.

Séminaires informels : Thème et variation autour de la bio-inspiration

Ces trois séminaires ont illustré la complémentarité entre les observations de la nature et une démarche d'ingénieur. Tant pour la conception de matériaux bio-inspirés que pour l'analyse de concepts utilisés dans les biomatériaux (comme les interfaces diffusives), ou pour l'analyse de systèmes (comme les systèmes olfactifs des insectes).

- Multicouches biomimétiques (Florian Bouville, INSA-Lyon) ;
- Interfaces diffusives (Natasha Vermaak, SIMAP-Grenoble) ;
- Capteurs de flux miniature inspirés des insectes (Jérôme Casas, IRBI Tours).

Colloque : *Filling gaps in materials space: methods and applications*

Colloque international en langue anglaise, le colloque final de la chaire a eu lieu sur deux jours les 14 et 15 octobre 2013, sur le thème des stratégies d'innovations dans le domaine des matériaux. Dans une optique d'innovation technologique, il a permis de couvrir l'ensemble des stratégies qui ont été illustrées pendant le cycle de cours : la maîtrise des microstructures par la modélisation, l'extension de l'espace des matériaux par les matériaux architecturés, la recherche de solutions innovantes par bio-inspiration. Il est prévu que les actes soient publiés.

Liste des présentations :

- « Filling Gaps in Materials Space: Challenges and Methods », Yves Bréchet (Collège de France) ;
- « Biological Materials: Lessons for Multiscale, Multifunctional and Adaptive Design », Peter Fratzl (Max Planck Institute of Colloids and Interfaces, Allemagne) ;
- « Microstructural Design in Metallic Alloys », Alexis Deschamps (Grenoble INP) ;
- « Top Down Processing of Metallic Architected Materials », Damien Fabrègue (Insa de Lyon), Olivier Bouaziz (Arcelor Mittal et Mines ParisTech) ;
- « Designing Graded Microstructures via Phase Transformations », Qingquan Lai (Grenoble INP) ;
- « Sensors in Insects: from Entomology to Fluid Mechanics », Jérôme Casas (Université de Tours) ;
- « Friction Stir Mixing to Process New Composite Materials », Aude Simar (Université catholique de Louvain, Belgique) ;
- « Potential of Additive Processing for Architected Materials », Jean-Jacques Blandin (Grenoble INP), Rémy Dendievel (Grenoble INP) ;

- « Design Methods for Multimaterials », Hervé Wargnier (Université Bordeaux I), François-Xavier Kromm (Université Bordeaux I) ;
- « Designing Multifunctional Sandwiches », Pierre Leite (Onera) ;
- « Architected Materials in Building Insulation », Bernard Yrieix (EDF) ;
- « Multimaterials Design for Electromagnetic Screening », Thomas Pardoën (Université catholique de Louvain, Belgique) ;
- « Architected Materials in Biology: an Evolutionary Viewpoint », John Dunlop (Max Planck Institute of Colloids and Interfaces, Allemagne) ;
- « Designing Architected Materials for Functional Applications », Stéphane Gorsse (Institut de chimie de la matière condensée, Bordeaux) ;
- « The Challenge of Impact Tolerance: Lessons in Multifunctional Architecture from Biological Materials », Garrett Milliron (Max Planck Institute of Colloids and Interfaces, Allemagne) ;
- « Examples of Steel Based Architected Materials », Jean-Philippe Masse (Arcelor Mittal), Olivier Bouaziz (Arcelor Mittal et Mines ParisTech) ;
- « Alternative Mineralised Skeletons Part 1 : Overview », Ron Shahar (Max Planck Institute of Colloids and Interfaces, Allemagne) ;
- « Alternative Mineralised Skeletons Part 2 : Examples », Mason Dean (Max Planck Institute of Colloids and Interfaces, Allemagne) ;
- « Multimaterials and Architected Materials for Medical Applications », Denis Favier (Grenoble INP) ;
- « Plant Material Adaptation », Michaela Eder (Max Planck Institute of Colloids and Interfaces, Allemagne), Vanessa Schöppler (Max Planck Institute of Colloids and Interfaces, Allemagne) ;
- « Shape Optimisation Methods for Architected Materials Design », Laurent Laszczyk (Constellium) ;
- « Shape Optimisation for Interface Design », Natasha Vermaak (Lehigh University, États-Unis), Georgios Michailidis (École polytechnique) ;
- « Pattern of Shape Change Controlled by Eigenstrain Architectures », Sébastien Turcaud (Max Planck Institute of Colloids and Interfaces, Allemagne) ;
- « Concluding Remarks », Yves Bréchet (Collège de France).