

PEPR DIADEM

Présentation générale

Discovery **A**cceleration for the
Deployment of **E**merging **M**aterials

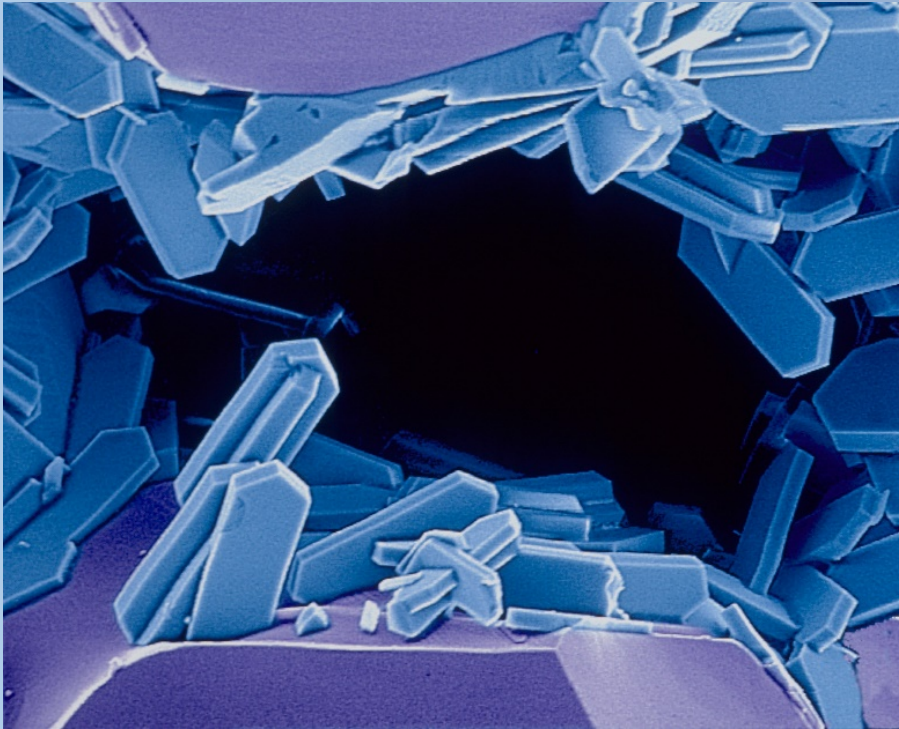
Dispositifs **I**ntégrés pour l'**A**ccélération
du **D**Éploiement de **M**atériaux
Émergents

*Frédéric Schuster / CEA
Mario Maglione / CNRS
Alexandre Legris / CNRS*

LA DÉCOUVERTE ACCÉLÉRÉE DES MATÉRIAUX

© Didier COT-CMRS

LA DÉCOUVERTE DES MATÉRIAUX

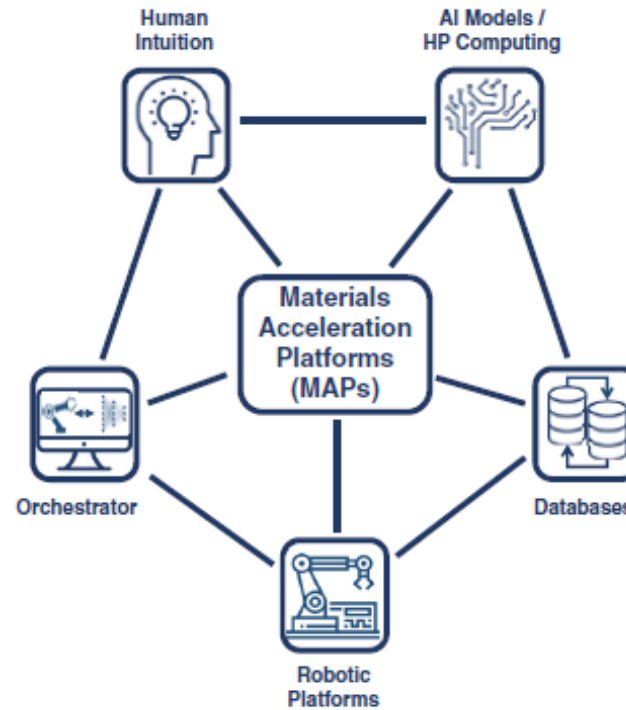


CHALLENGES

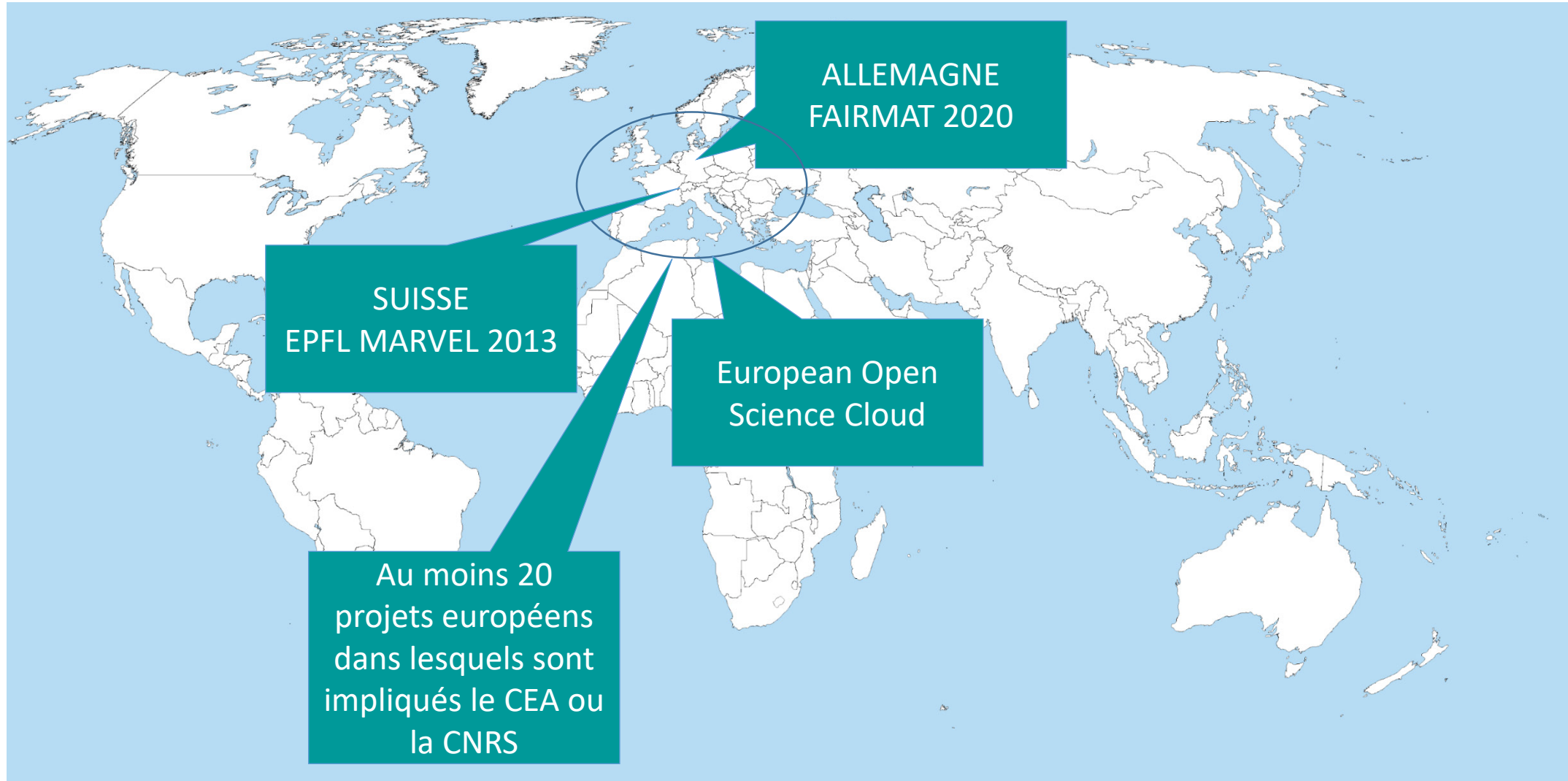
- De nombreux domaines technologiques reposent sur la découverte des matériaux : énergie, transport, santé, transition numérique...
- La mise en œuvre effective des nouveaux matériaux est d'autant plus retardée (plus d'une décennie d'essais et d'erreurs) que leur complexité augmente.
- Contexte du Green Deal et exigences en matière de croissance durable : maîtrise du cycle de vie, sobriété énergétique, minimisation de l'utilisation des ressources critiques

L'intelligence artificielle peut contribuer à relever tous ces défis

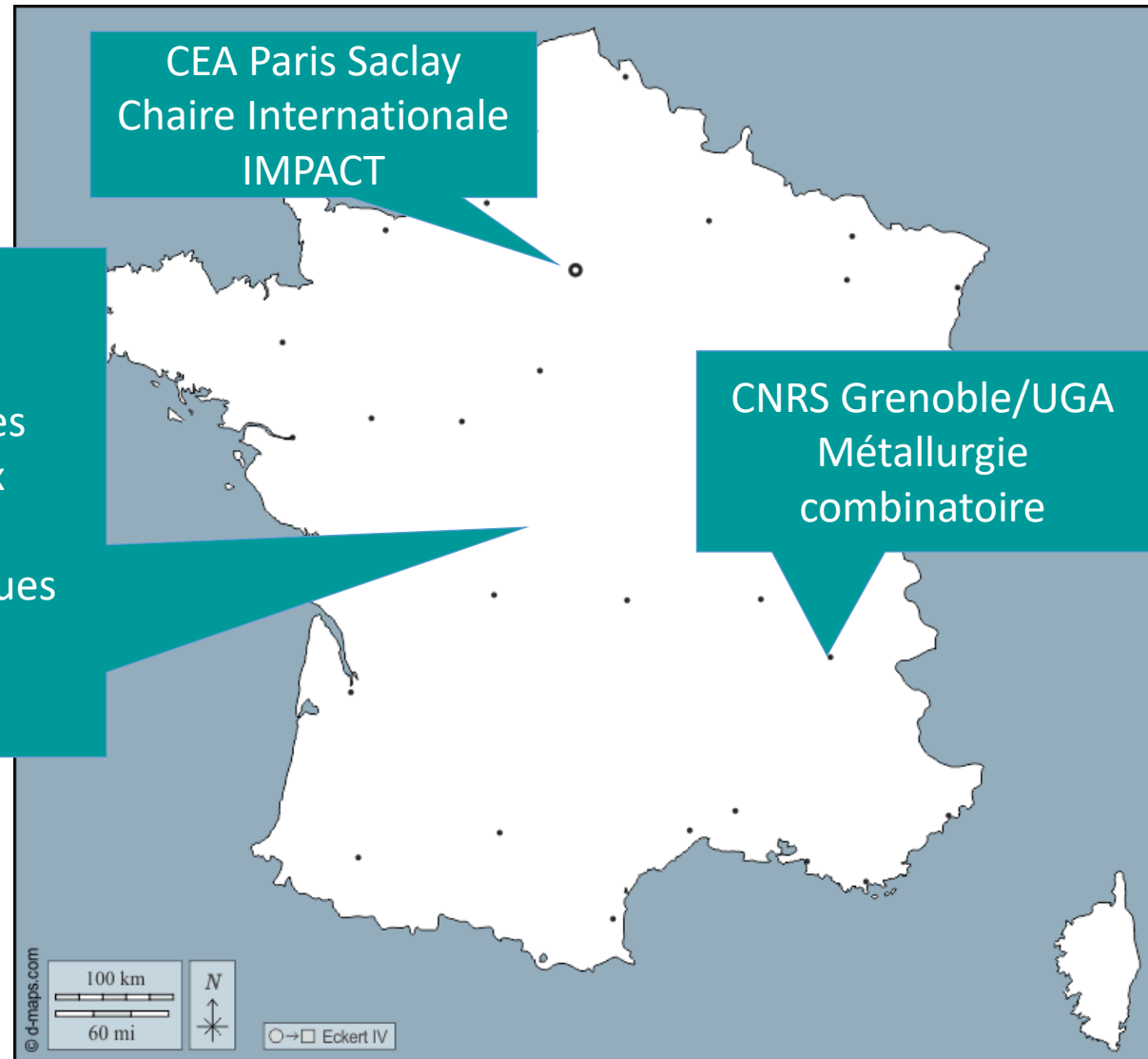
ACCÉLÉRATION DEPUIS LE LANCEMENT DE LA MATERIALS GENOME INITIATIVE AUX US



PROJETS EUROPÉENS EN COURS



PROJETS NATIONAUX EN COURS



Réseaux CNRS/CEA/Universités :
ALMA fabrication additive des alliages
SAM solidification des alliages métalliques
IAMAT IA pour la Science des Matériaux
GDR GAIA
TAMARYS Matériaux et transferts thermiques
EMILI Plasmas et Matériaux
...et beaucoup d'autres

PRINCIPES DE BASE DU PEPR DIADEM

© Didier COT-CMRS Photothèque

LIGNES DIRECTRICES ET SPÉCIFICITÉS

ENJEUX

- **Découverte accélérée de matériaux pour les grandes transitions** : l'énergie (batteries, filière hydrogène, nucléaire du futur...) et l'environnement, le numérique (électronique...), la santé
- **Substitution** de matières premières critiques et/ou toxiques
- **Diversité** des matériaux et des procédés de mise en œuvre (spécificité de **DIADEM** par rapport aux autres initiatives du même type)

OBJECTIFS

- Doter la France d'un **réseau de plateformes dédiées à la découverte accélérée** des matériaux
- Mettre à disposition ces plateformes pour la communauté scientifique via des **Appels à Projets** ouverts et au-delà du PEPR
- Développer à l'échelle nationale la **synergie entre la science des matériaux et l'intelligence artificielle**

LES DIFFÉRENTS OBJETS DU PEPR DIADEM

Plates-formes

- Conception numérique
- Synthèse et mise en forme haut-débit
- Caractérisation à haut-débit
- Bases de données & outils IA

Projets ciblés

- Démonstrateurs méthodologiques intégrés
- Construction de certaines plates-formes

Appel à projets (3 vagues)

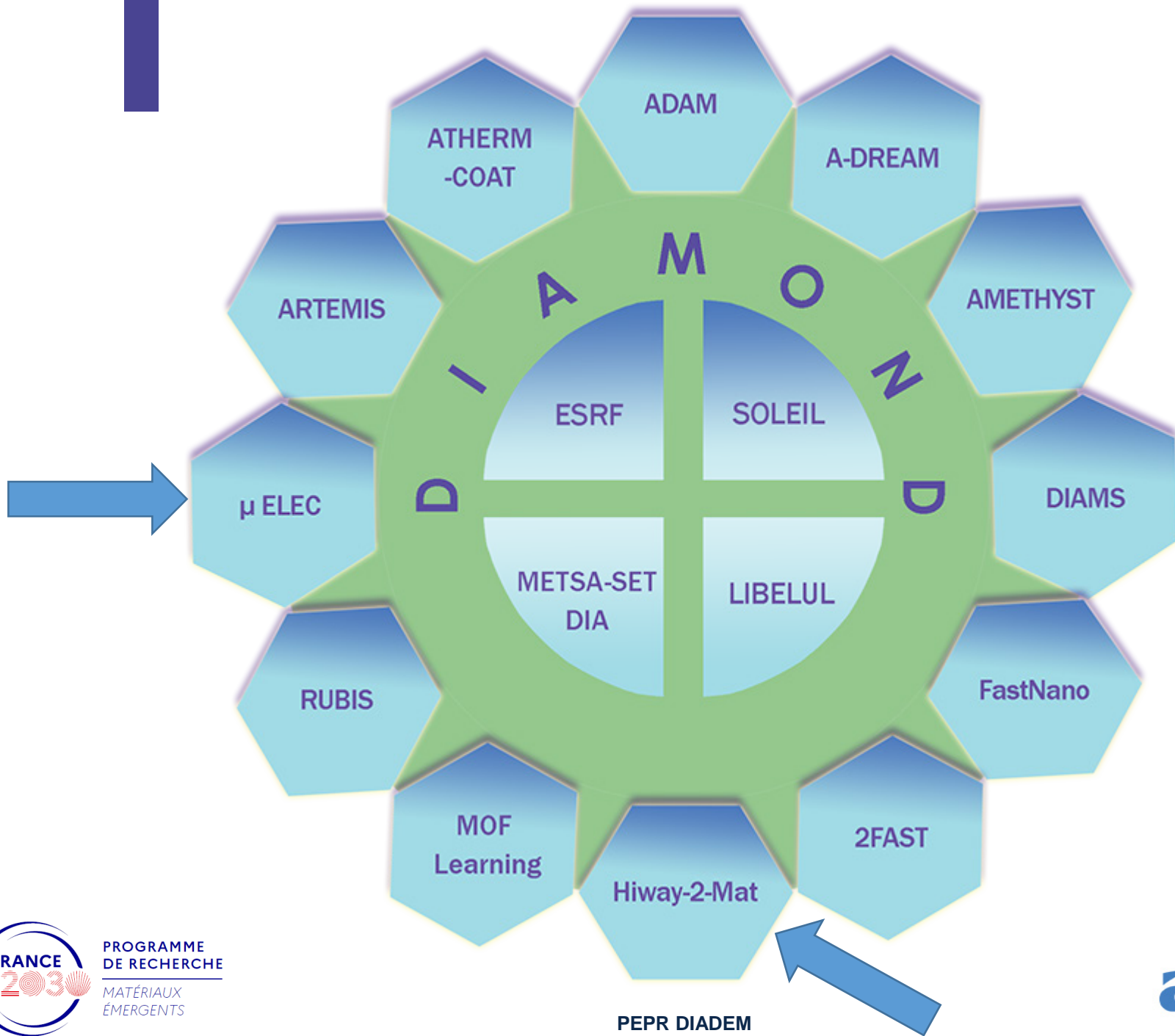
- 30 à 40 projets d'une aide comprise entre 800 k€ et 1M€
- Ouverture sur toute la communauté
- Possibilité d'ouverture internationale

AMI (5 projets)

- Outils de formation
- Ecoles Internationales

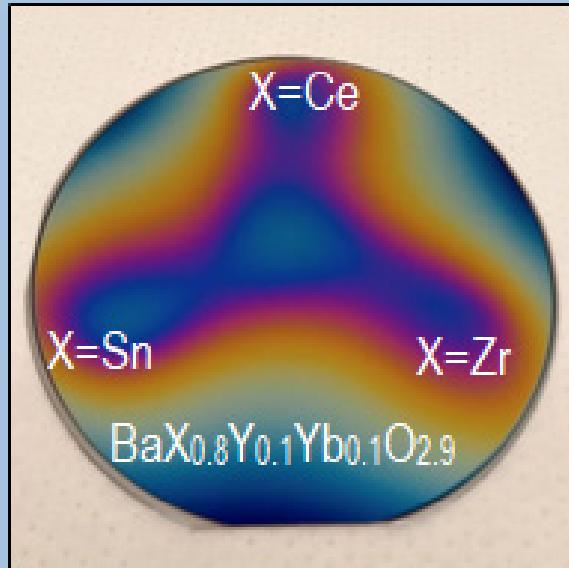
CONSTRUCTION ET VALIDATION DES PLATEFORMES

© Didier COT-CHEVREUIL



17 PROJETS CIBLÉS DE DÉMONSTRATION: PLATES-FORMES OUVERTES ASSISTÉES PAR L'IA AU CŒUR DU DISPOSITIF

CHIMIE DU SOLIDE COMBINATOIRE: COUCHES MINCES



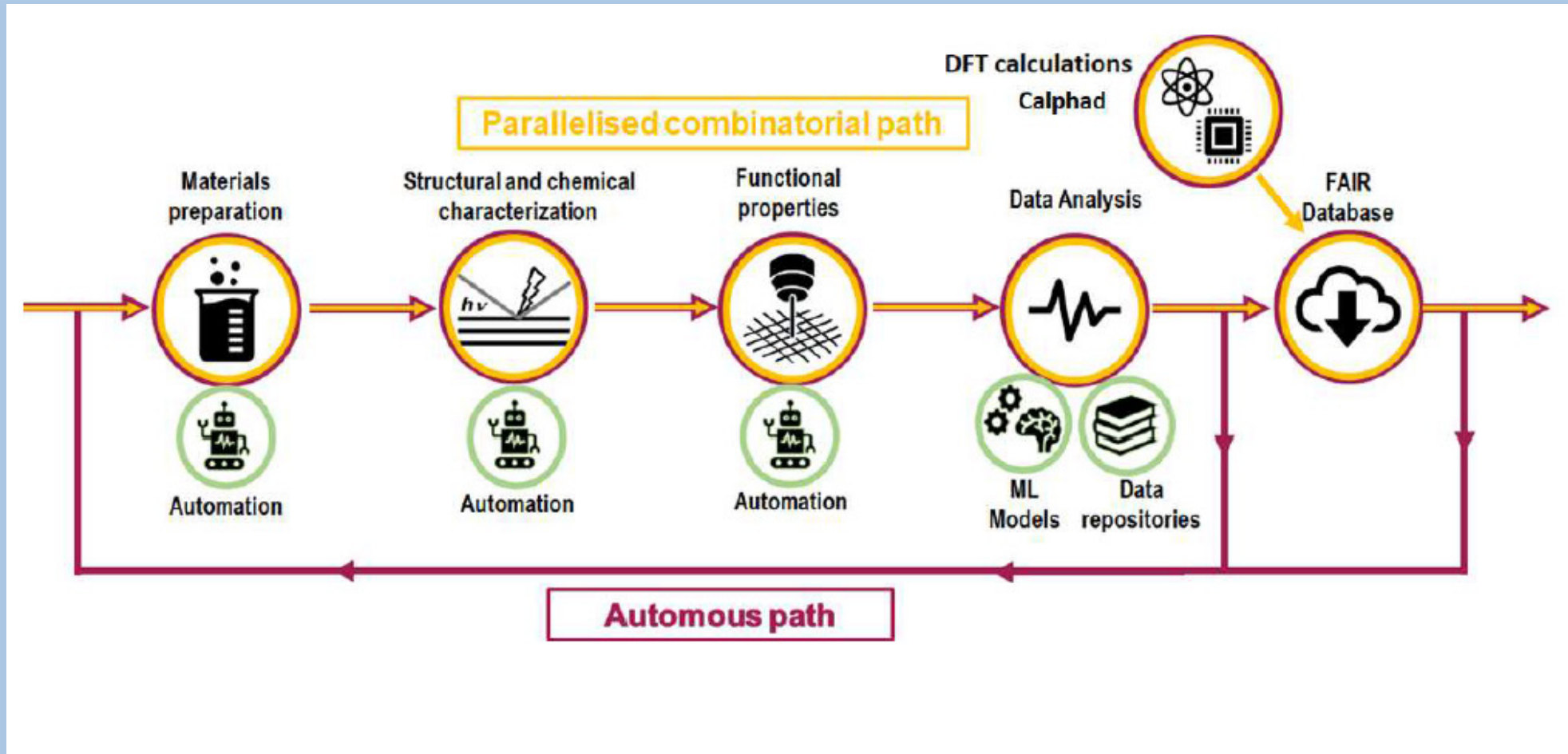
Un diagramme ternaire sur quelques centimètres carrés (G.Dezanneau, à *paraître*)



PVD multicibles

guilhem.dezanneau@centralesupelec.fr

CHIMIE DU SOLIDE COMBINATOIRE : HIWAY-2-MAT



guilhem.dezanneau@centralesupelec.fr

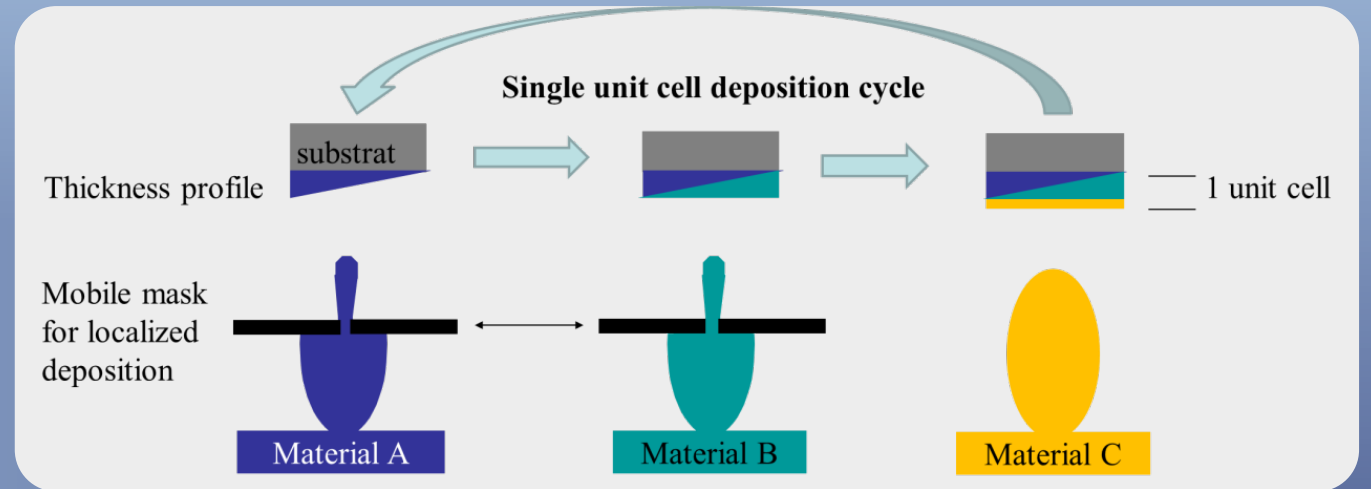
Automatisation des analyses structurales et apprentissage profond pour la recherche de nouvelles phases perovskites pour le photovoltaïque



“Perovskite or Not Perovskite? A Deep Learning Approach to Automatically Identify New Hybrid Perovskites from X-ray Diffraction Patterns” F. Massuyeau, T. Broux, F. Coulet, A. Demessence, A. Mesbah, R. Gautier, *Advanced Materials*, 34, 41, (2022) (doi/10.1002/adma.202203879)

Romain.Gautier@cnrs-imn.fr

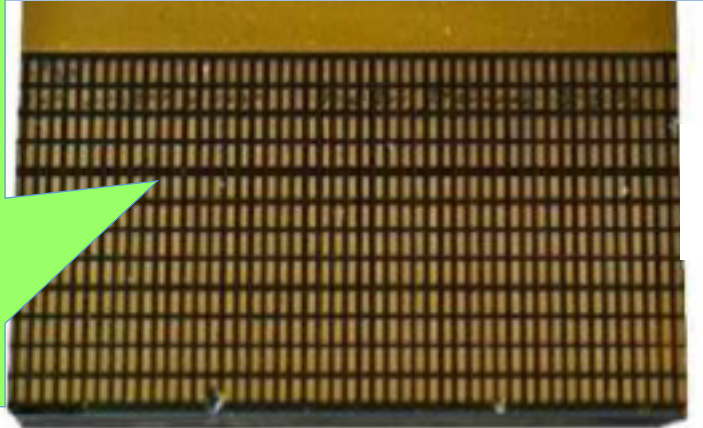
PLD COMBINATOIRE : MICROELEC



Jerome Wolfman <wolfman@univ-tours.fr>

600 ÉCHANTILLONS SUR QUELQUES CM²

- Synthèse haut débit
- Cactérisations structurales et fonctionnelles automatisées

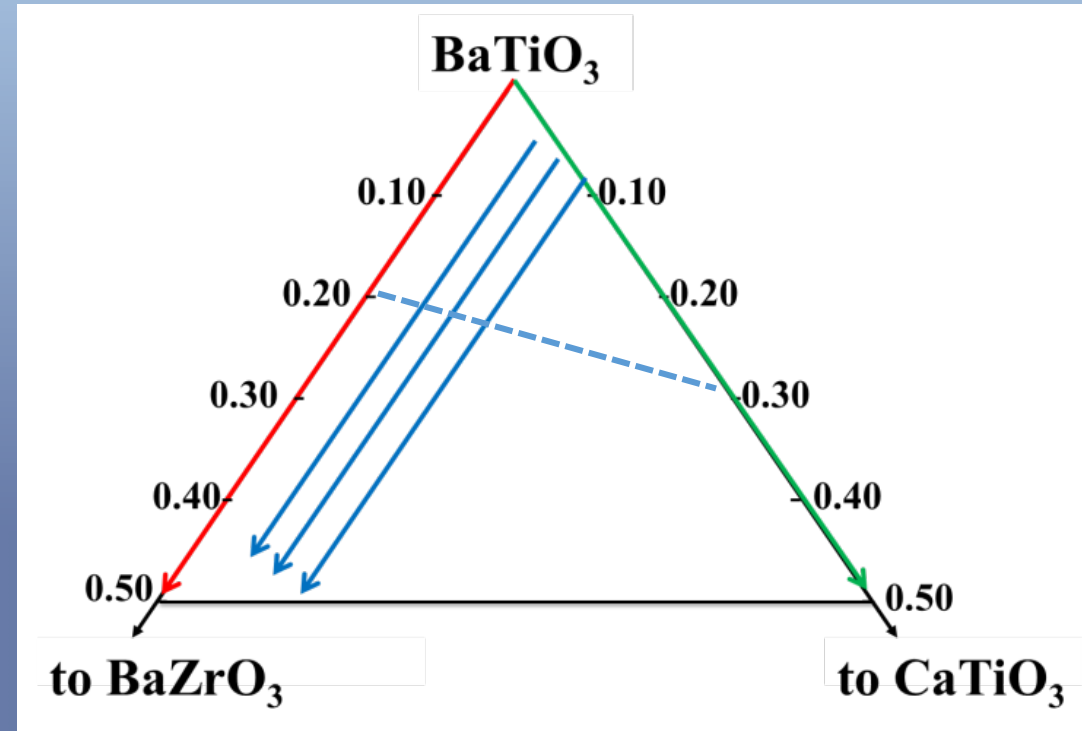


Zr fixée sur 12 condensateurs

Oxyde à haute entropie $(\text{Ba,Ca})(\text{Ti,Zr})\text{O}_3$
Composition en Zr croissante le long de la ligne

Tunability Investigation in the BaTiO_3 - CaTiO_3 - BaZrO_3 Phase Diagram Using a Refined Combinatorial Thin Film Approach.

Daumont, C.; Simon, Q.; Payan, S.; Gardes, P.; Poveda, P.; Maglione, M.; Negulescu, B.; Jaber, N.; Wolfman, J
J. Coatings **2021**, 11, 1082



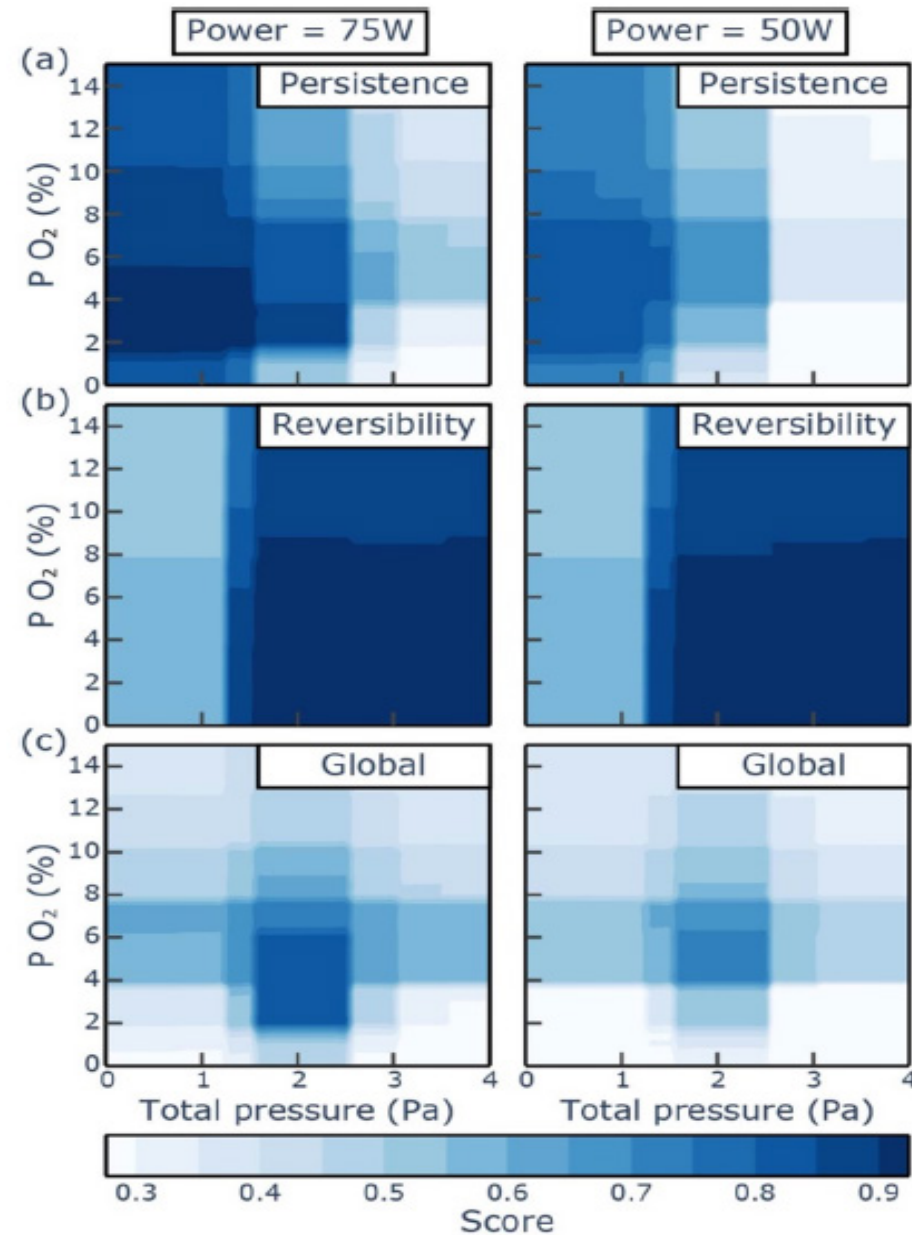
Optimiser par l'IA les paramètres plasma pour des propriétés électrochromes avancées de couches minces de WO_3

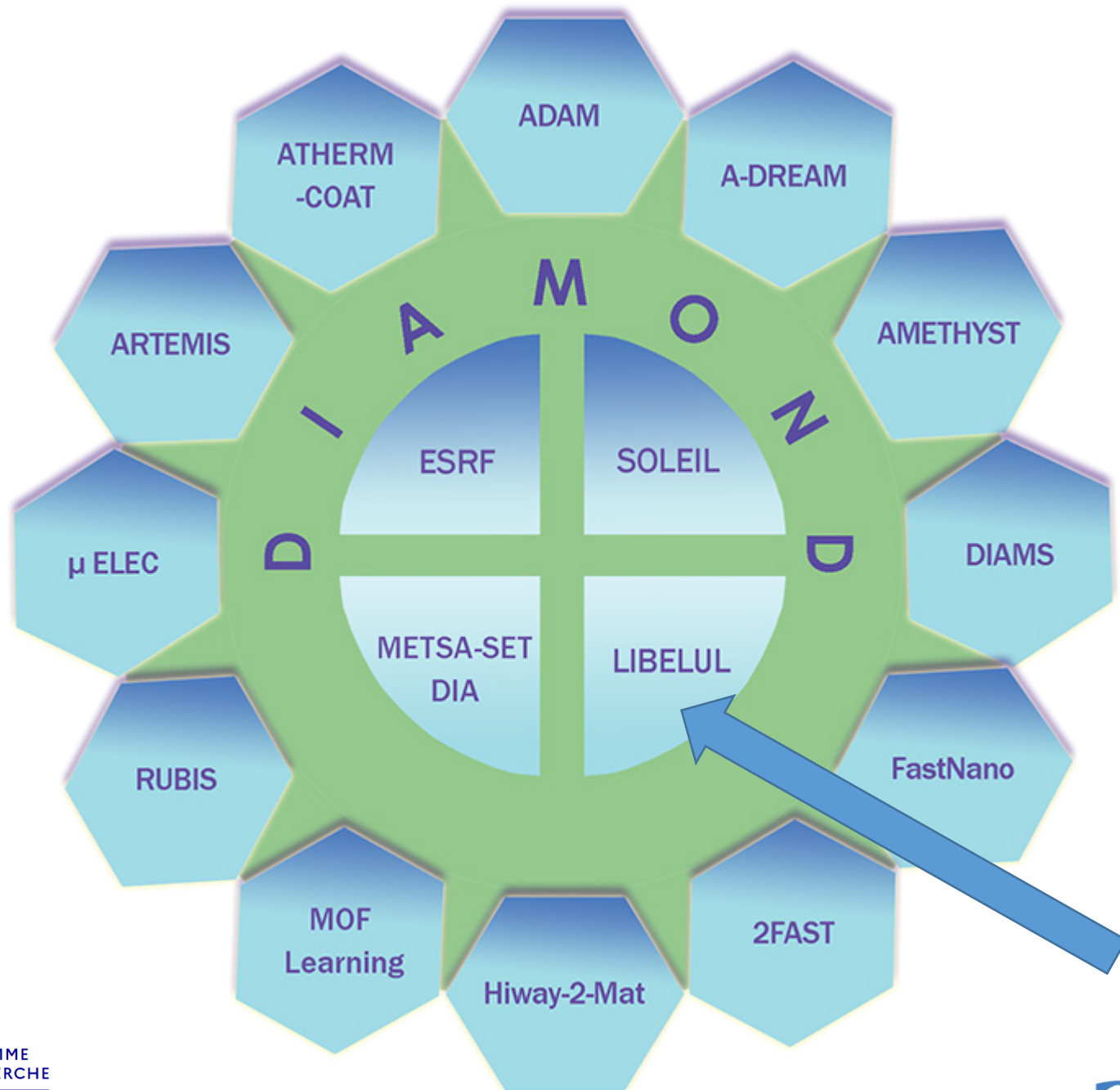
Toward the Prediction of Electrochromic Properties of WO_3 Films: Combination of Experimental and Machine Learning Approaches

Brandon Faceira, Lionel Teule-Gay, Gian-Marco Rignanese, and Aline Rougier*

J. Phys. Chem. Lett. 2022, 13, 8111–8115

Aline.rougier@icmcb.cnrs.fr



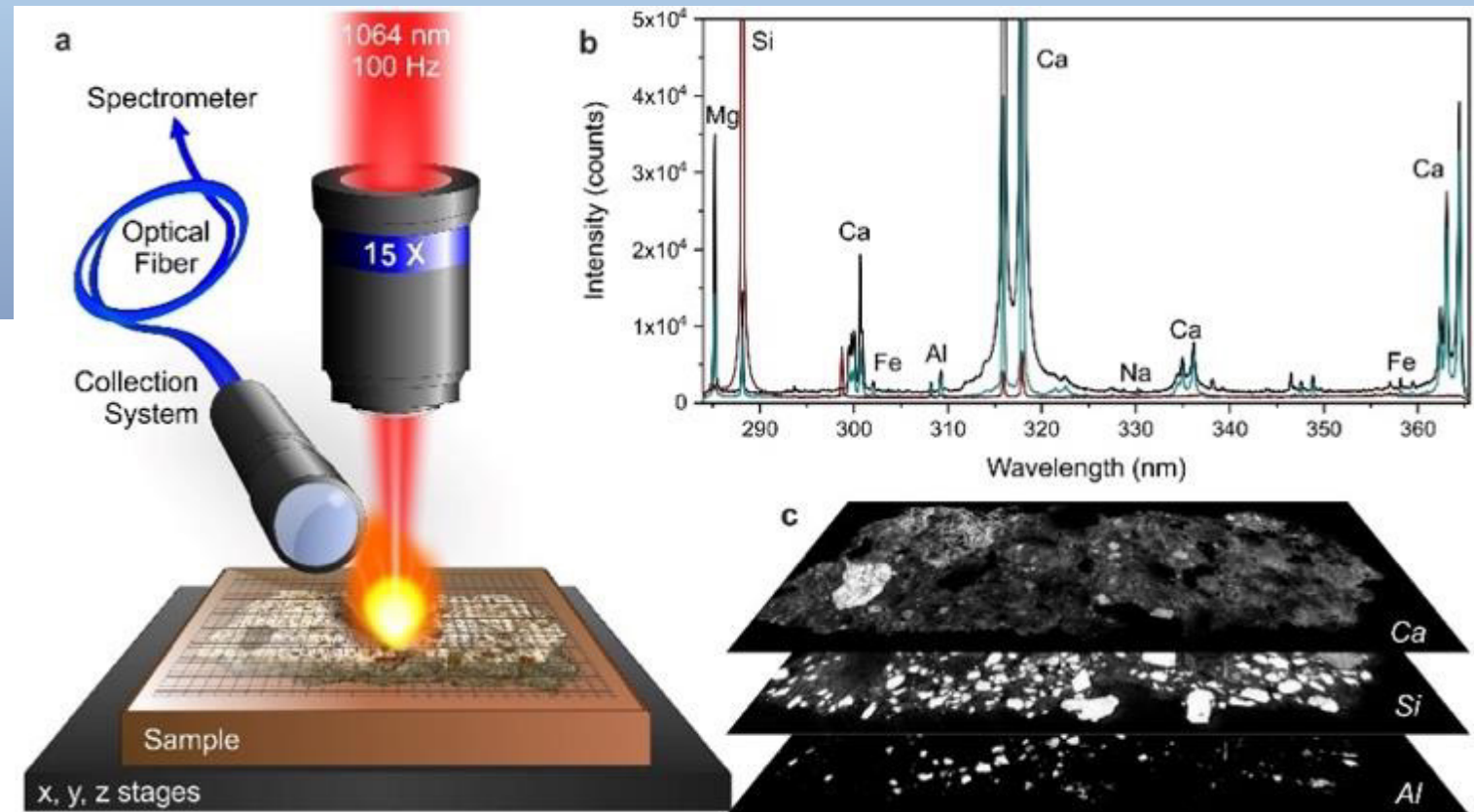


17 PROJETS CIBLÉS
 DE DÉMONSTRATION:
 PLATES-FORMES
 OUVERTES ASSISTÉES
 PAR L'IA AU CŒUR DU
 DISPOSITIF

SPECTROSCOPIE LIBS À HAUT DÉBIT

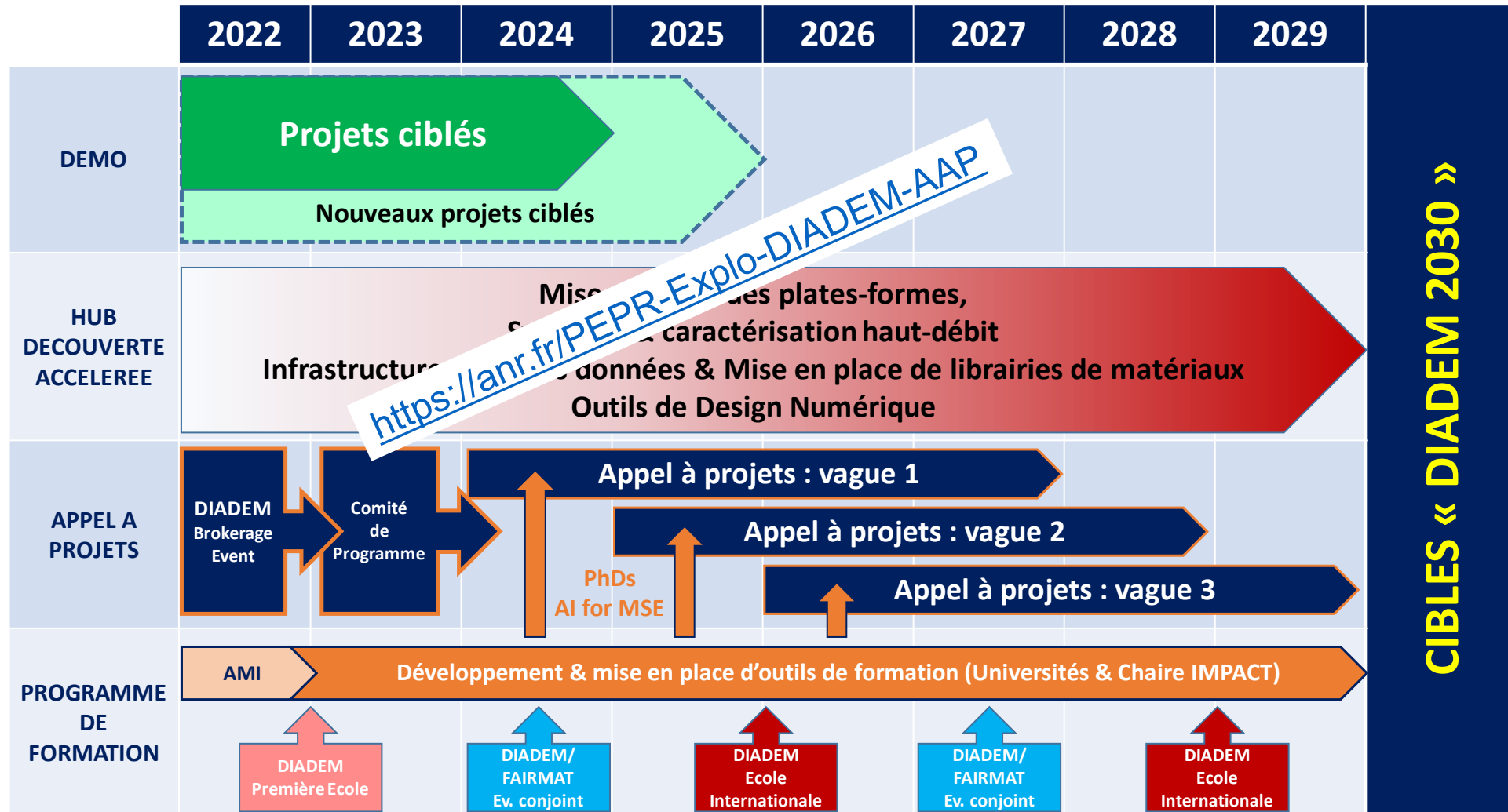
Artificial neural network for high-throughput spectral data processing in LIBS imaging: application to archaeological mortar†

N. Herreyre, A. Cormier, S. Hermelin, C. Oberlin, A. Schmitt, V. Thirion-Merle, A. Borlenghi, D. Prigent, C. Coquidé, A. Valois, C. Dujardin, P. Dugourd, L. Duponchel, C. Comby-Zerbino and V. Motto-Ros
J. Anal. At. Spectrom., 2023,38, 730-741

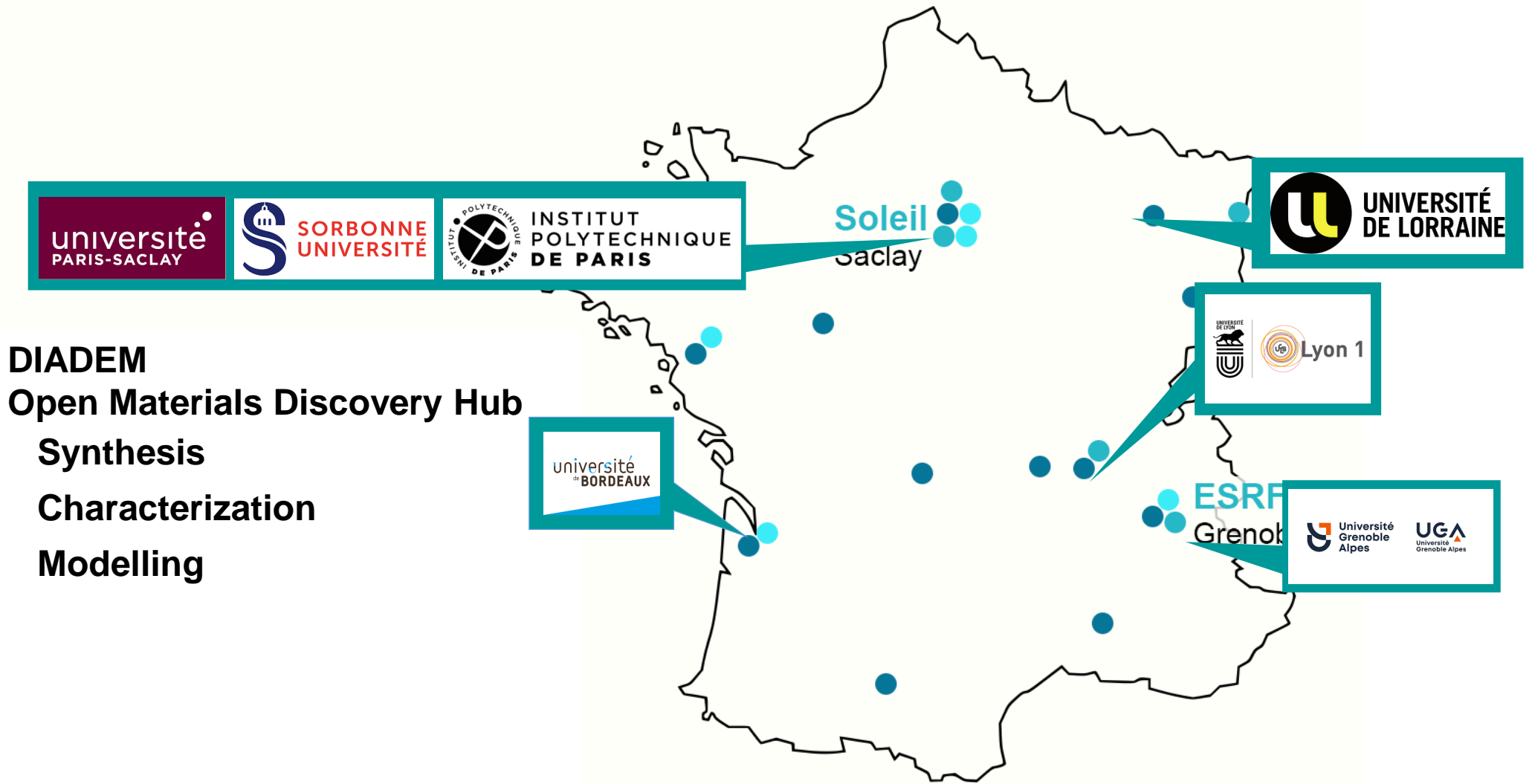


christophe.dujardin@univ-lyon1.fr

PLANNING GLOBAL DU PEPR DIADEM



PLATEFORMES & UNIVERSITÉS PARTENAIRES

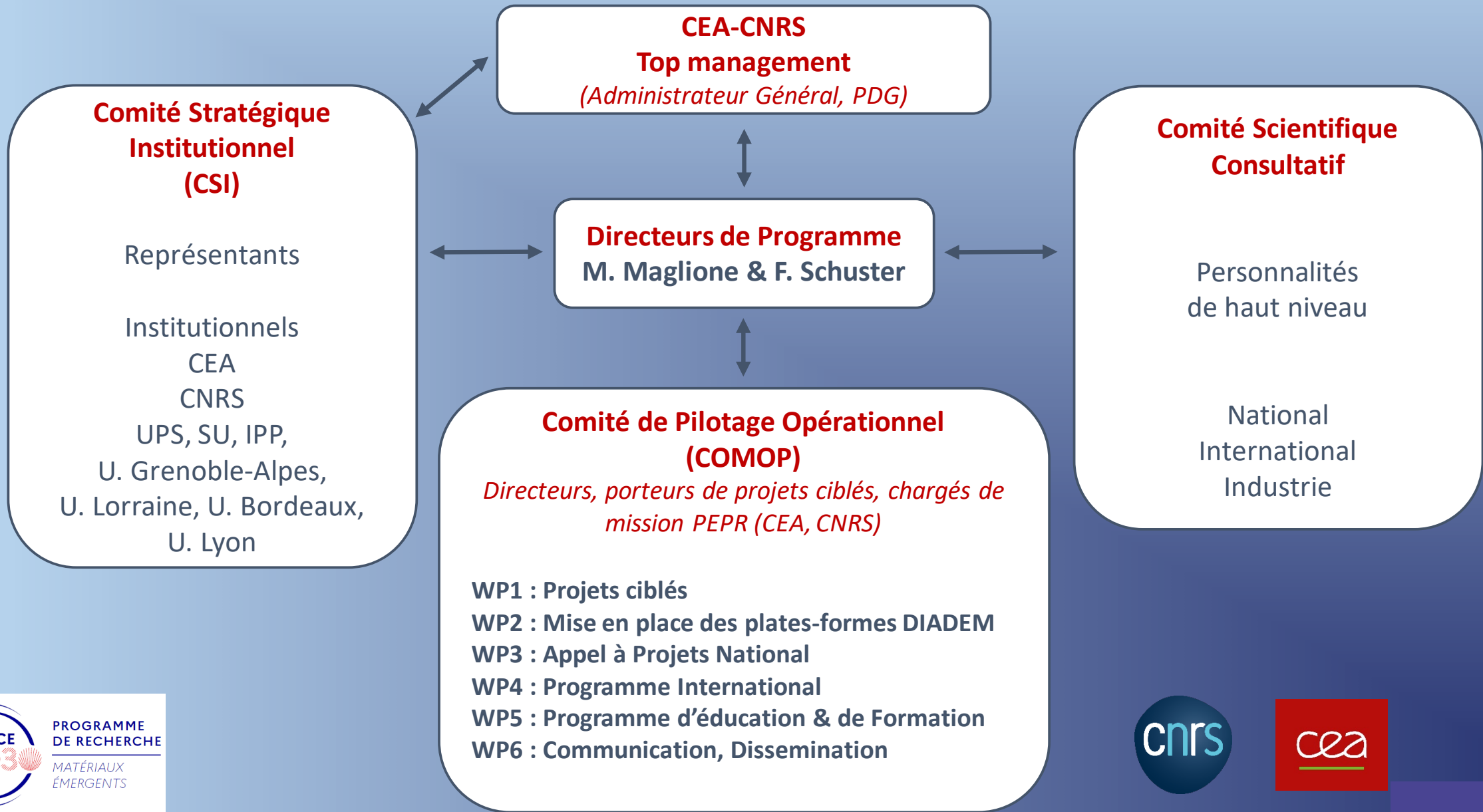


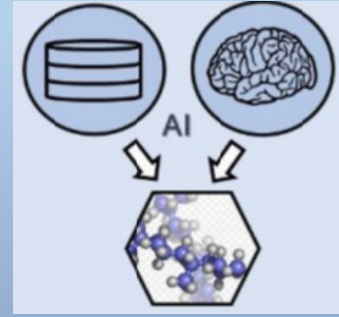
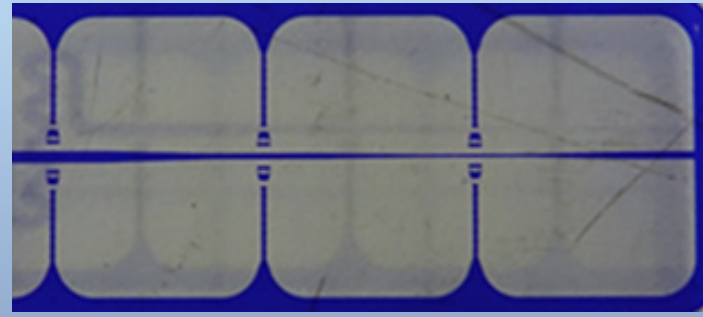
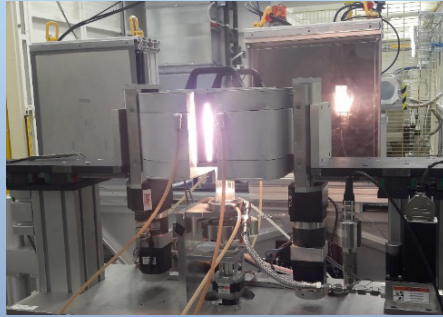
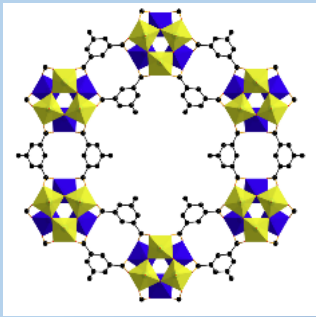
DIADEM
Open Materials Discovery Hub
Synthesis
Characterization
Modelling

SYNTHÈSE BUDGÉTAIRE

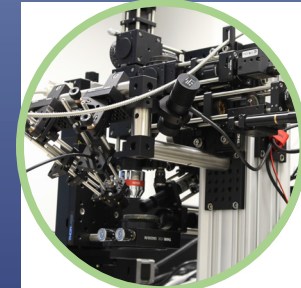
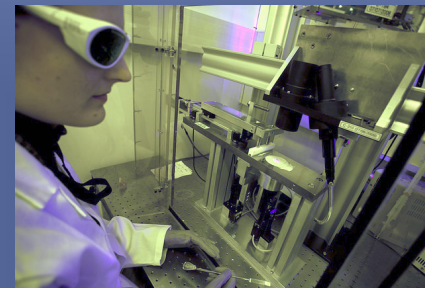
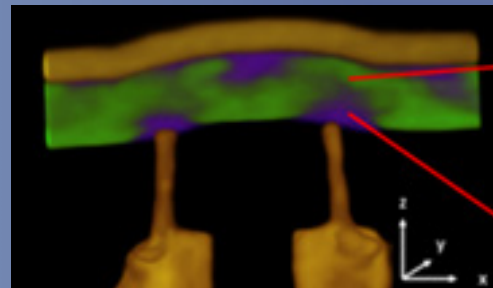
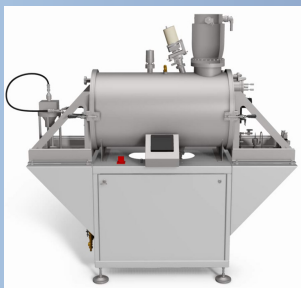
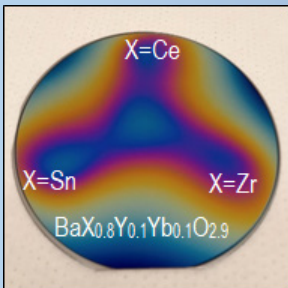
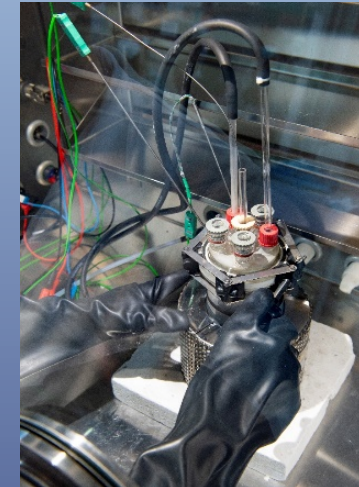
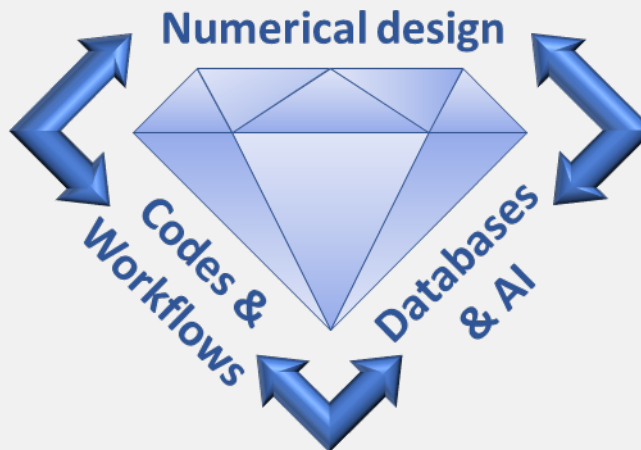
Action	Budget	%	Commentaire
Projets ciblés & plates-formes	45.6 M€	54.2%	dont 34 M€ (40%) pour les équipements
Appel à projets	32 M€	38 %	30 à 40 projets seront retenus
Appel à Manifestation d'Intérêt Education/Formation	3 M€	3,6 %	5 projets prévus
Internationalisation, Animation scientifique, Management	3,5 M€	4.2%	Incluant écoles, workshops

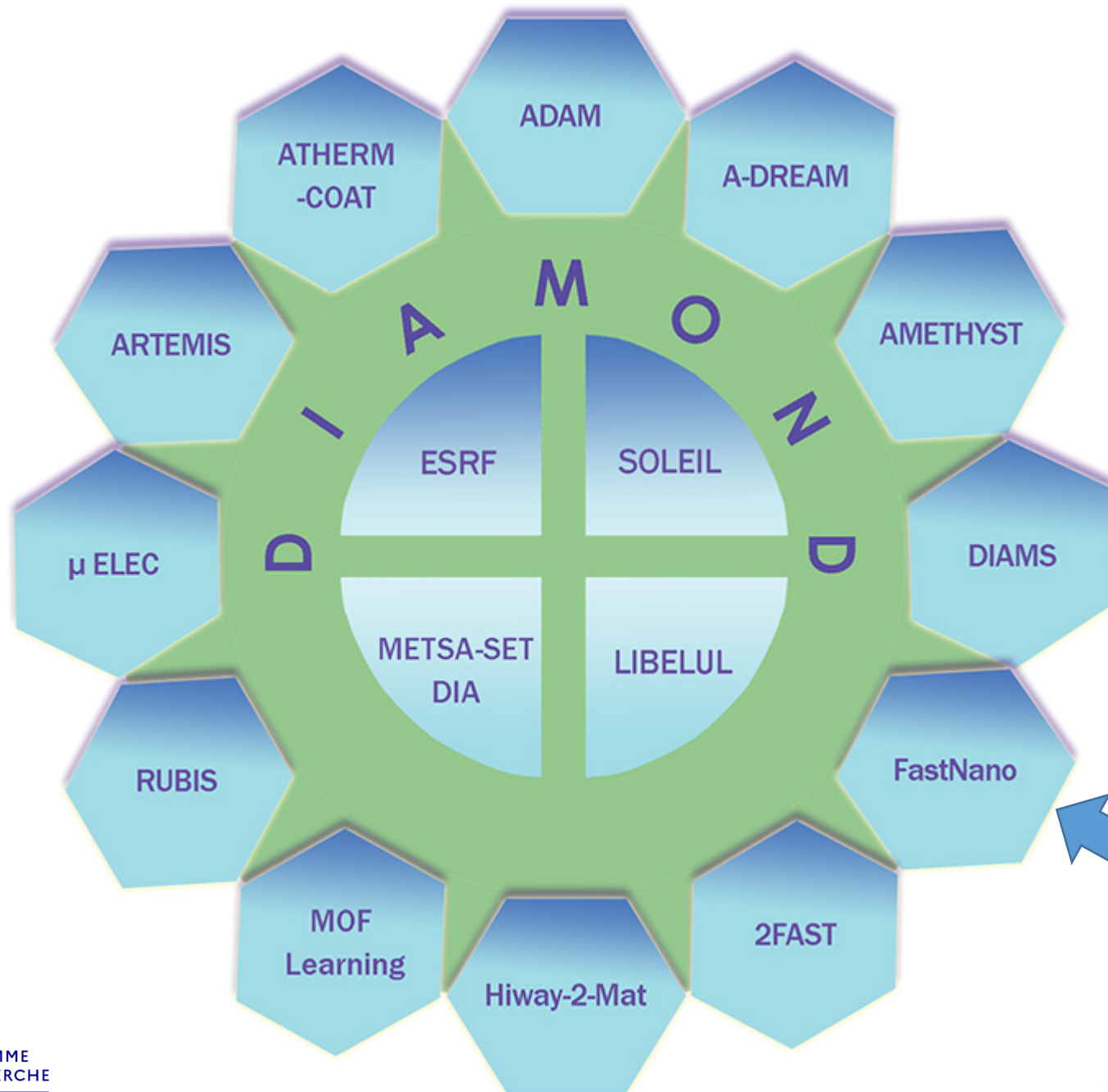
COMITÉS & STRUCTURE DE MANAGEMENT



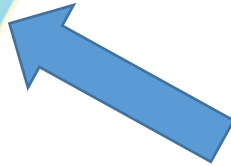


DIADEM... LES MATÉRIAUX... AUTREMENT





17 PROJETS CIBLÉS DE DÉMONSTRATION: PLATES-FORMES OUVERTES ASSISTÉES PAR L'IA AU CŒUR DU DISPOSITIF



FASTNANO : CARACTÉRISATION SAXS HAUT DÉBIT



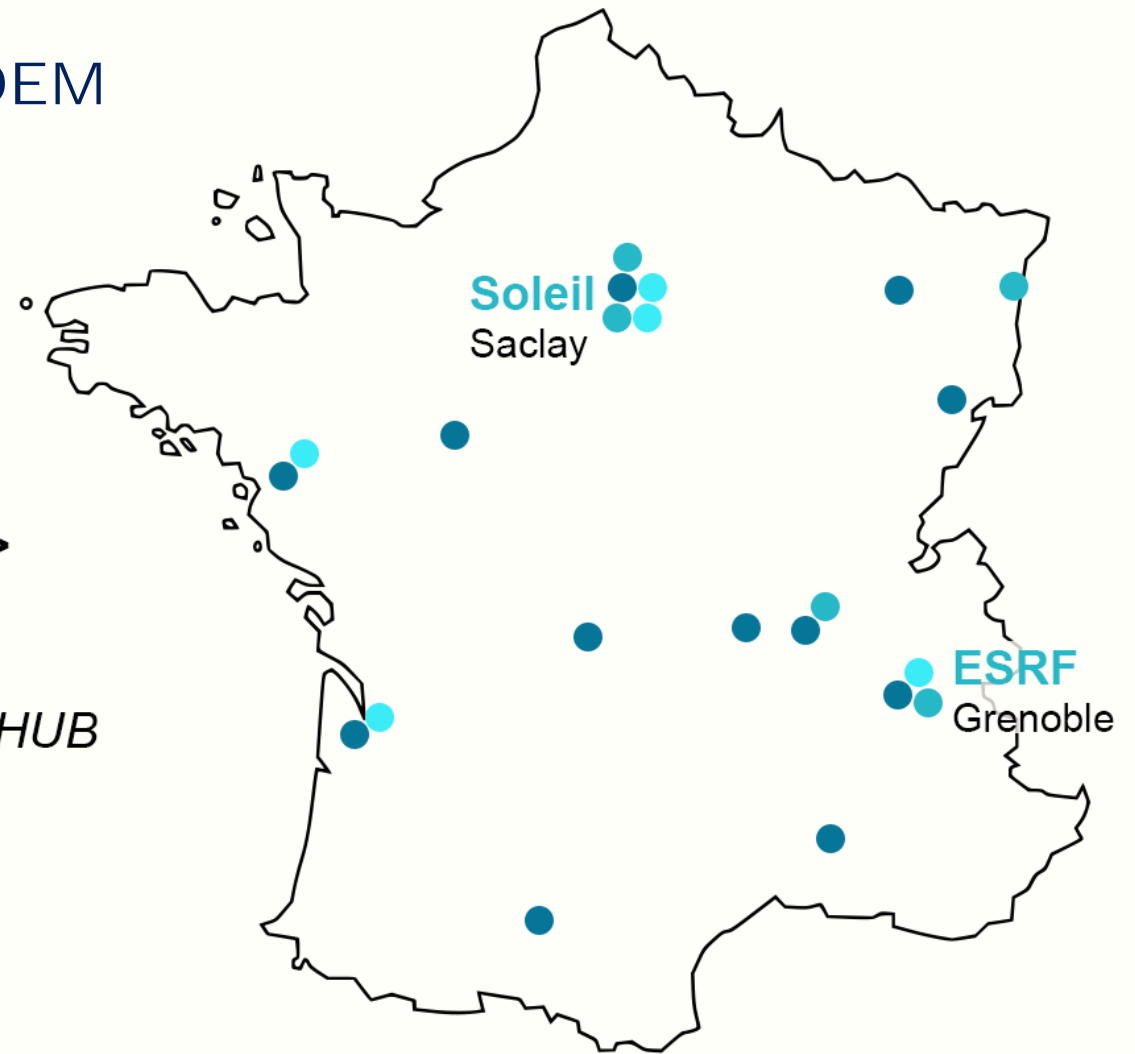
yann.leconte@cea.fr

LES PLATEFORMES DE DIADEM

PEPR exploratoire Diadem >
Plateformes en cours
de développement formant
le *Open Materials Discovery HUB*

- **Synthèse**
- **Caractérisation**
- **Modélisation**

Base de données
(plateforme virtuelle)



© CNRS

DEROULEMENT DU PROJET: FORMATION ET AAP

© Didier COT-CNRS Photothèque



Développement d'outils de formation

- Développement de formations spécifiques en lien avec les acteurs universitaires
- Nouveaux modules d'enseignement dans le cadre de la Chaire Internationale IMPACT (ex : numérique pour l'économie circulaire)
- Organisation d'écoles thématiques internationales



Appel à Manifestation d'Intérêt doté de 3 M€



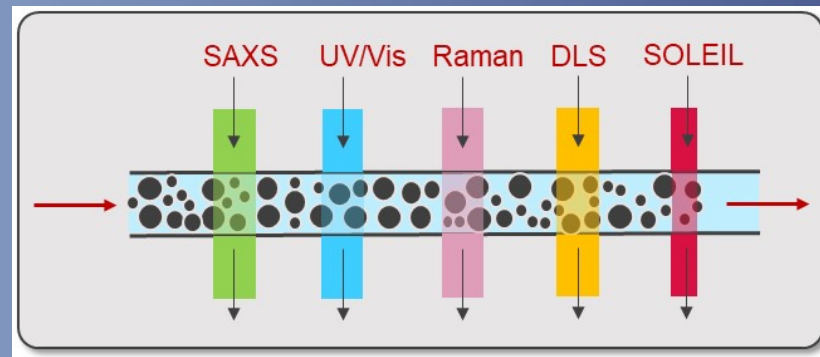
Multi source (Mo, Cu)
Motorized Q range – detector
Fully automated

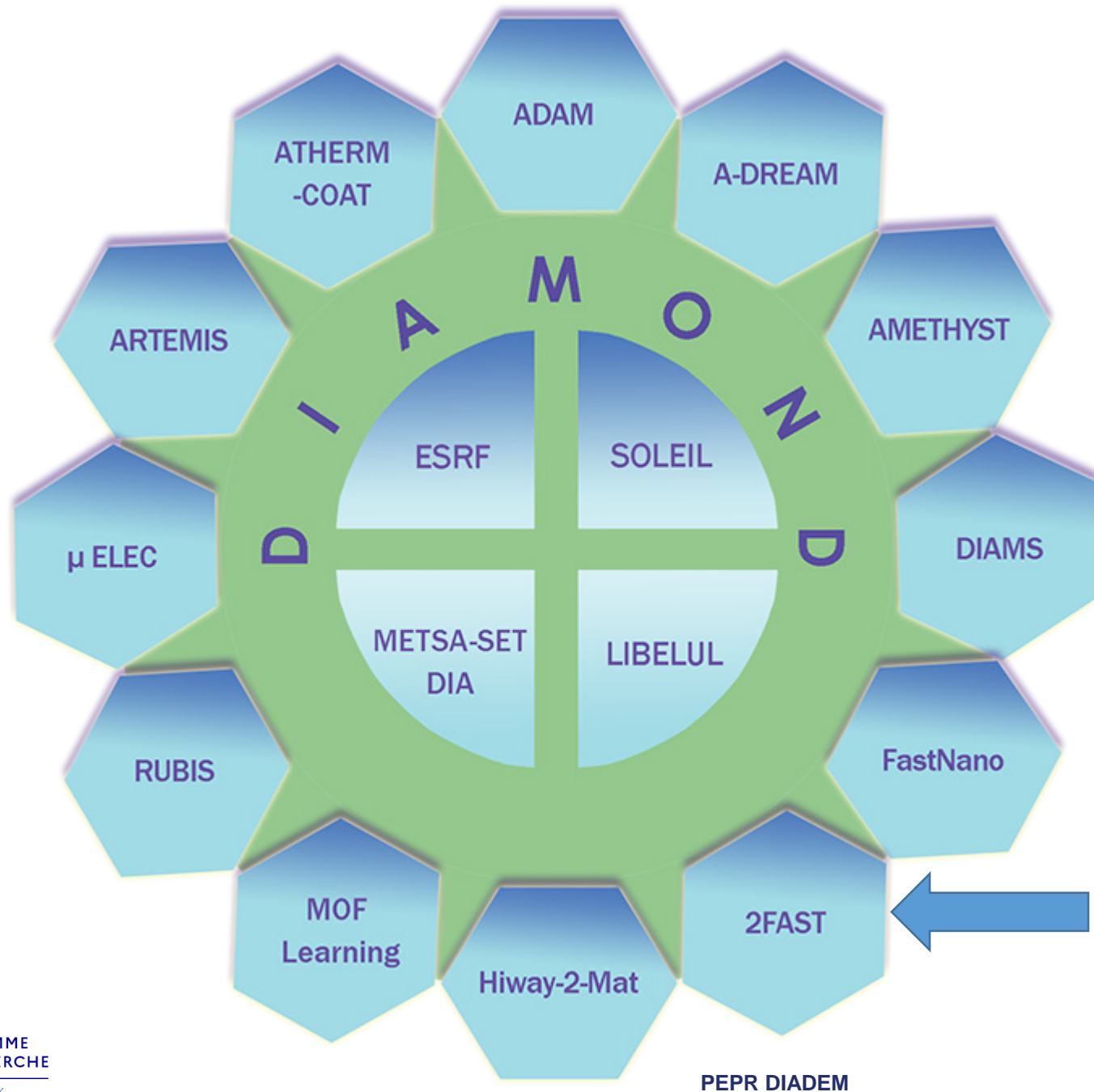
High Flux and Reliability
USAXS module
Accessible size range :
1nm to 1 μ m

Coupled to UV-Vis, Raman,
(DLS ?)



FASTNANO



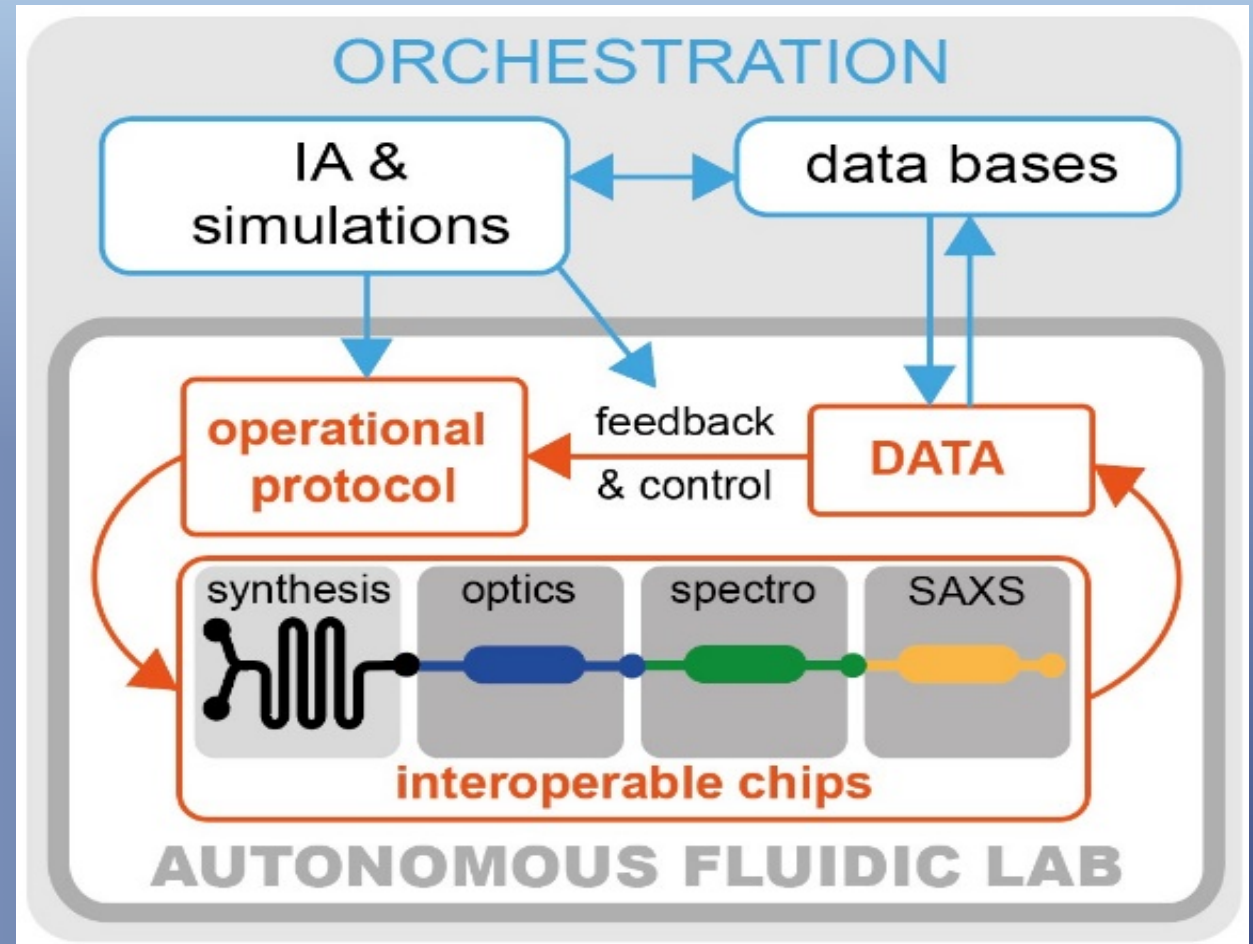
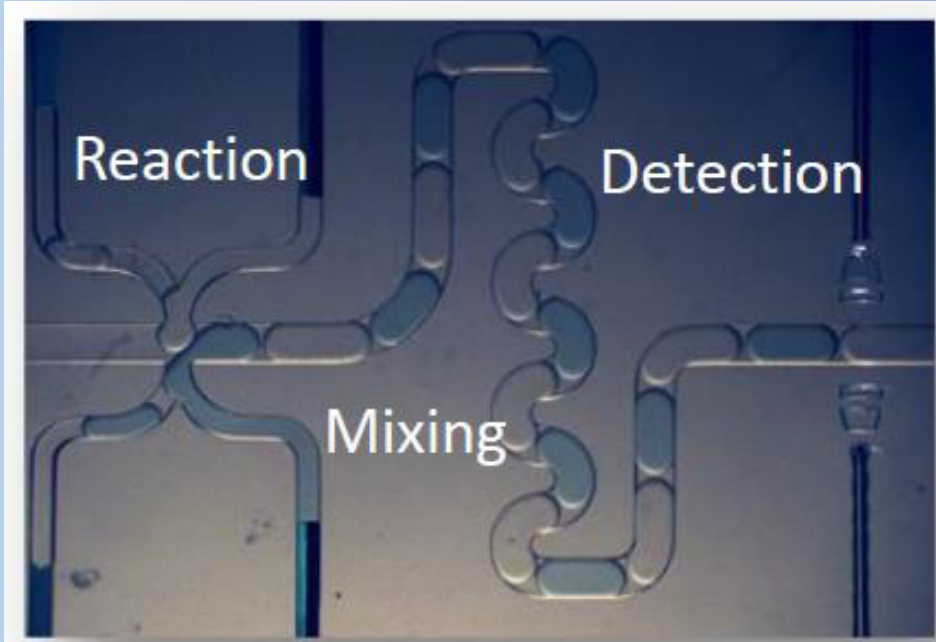


17 PROJETS CIBLÉS
DE DÉMONSTRATION:
PLATES-FORMES
OUVERTES ASSISTÉES
PAR L'IA AU CŒUR DU
DISPOSITIF

INTENSIFICATION DES PROCÉDÉS PAR MICROFLUIDIQUE



ISEC, LIONS
ICMCB, LGC, LOF



sophie.charton@cea.fr

