

Le projet **DIADEM** : accélérer la découverte de nouveaux matériaux grâce à l'intelligence artificielle

*Mario Maglione, Directeur de recherche CNRS ICMCB Bordeaux,
Co-pilote du PEPR DIADEM.*

Introduction

Le programme DIADEM ([Figure 1](#)) (un acronyme qui marche aussi bien en anglais qu'en français) signifie en français : Dispositif Intégré pour l'Accélération du Déploiement de Matériaux Emergents. Ce programme copiloté par le CNRS et le CEA dans le cadre du programme France 2030 a été lancé, pour ce qui nous concerne, en 2021, dans le

cadre du PIA¹. L'objectif de ce type de programme est de construire des équipements qui vont devenir différenciants et qui vont provoquer des changements notables, structurants pour la recherche en France. Ce chapitre décrit ce programme en essayant de donner quelques exemples de ce qu'on veut faire pour la découverte accélérée des matériaux.

1. PIA : Programme d'Investissement d'Avenir.

1 La découverte accélérée des matériaux

1.1. Les défis

De nombreux domaines technologiques reposent sur la découverte des matériaux : énergie, transport, santé, transition numérique. Nous connaissons les enjeux dans ces différents domaines et notamment la **notion de temps limité pour réaliser ces transitions**.

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 : c'est le cas par exemple des batteries qui sont des assemblages très complexes de matériaux.

Le troisième défi est qu'en plus, et c'est une nécessité absolue dont tous les

chercheurs sont parfaitement convaincus, il faut respecter des contraintes de plus en plus drastiques concernant l'environnement, la maîtrise du cycle de vie des matériaux, la sobriété énergétique et les matériaux critiques.

Notre programme a pour objectif d'utiliser des techniques de l'intelligence artificielle pour relever ces défis.

L'accélération de la découverte des matériaux a été initiée pour une grande part aux États-Unis avec ce que les Américains ont appelé la *Materials Genome Initiative*² dans les années 2010. On voit (*Figure 2*) la photo de l'inauguration de cette initiative, centrée sur ce que les Américains appellent les MAPs (*Materials*

2. *Materials Genome Initiative* : Initiative sur le génome des matériaux.

PEPR DIADEM

Présentation générale

Discovery Acceleration for the Deployment of Emerging Materials

Dispositifs Intégrés pour l'Accélération du Déploiement de Matériaux Émergents

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

anr®

FRANCE 2030

Figure 1

Le projet DIADEM.

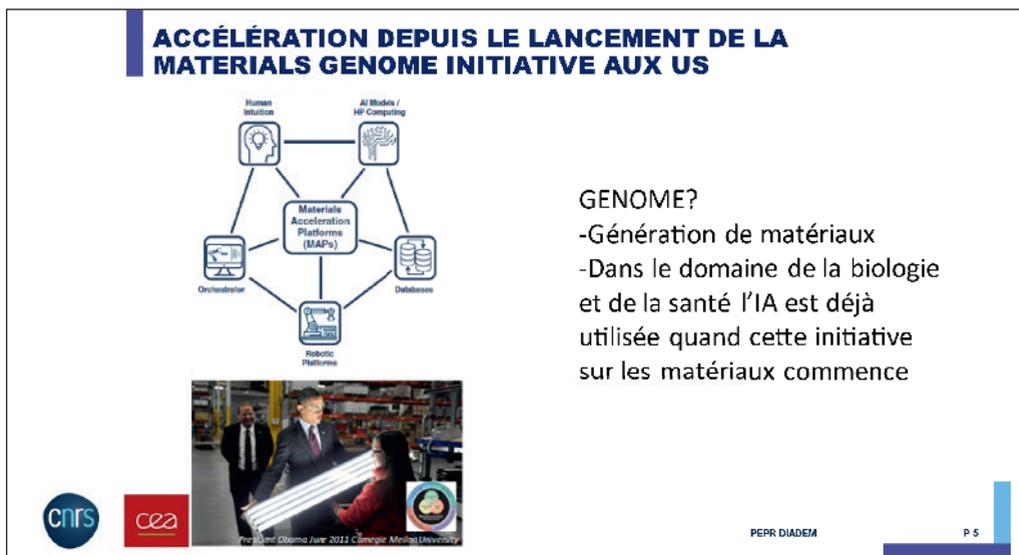


Figure 2

La Materials Genome Initiative.

Acceleration Platform)³. Depuis ce lancement, de nombreuses initiatives ont fait jour, et on assiste à des travaux de plus en plus nombreux dans ce domaine.

Des échanges avec des collègues américains, dont le porteur de ce projet *Materials Genome Initiative*, m'ont montré que l'utilisation du mot « genome » n'est pas un hasard. Certes il s'agit de générer de nouveaux matériaux, mais l'acronyme GENOME se réfère aussi à tout ce qui a été fait dans le domaine de la biologie et de la santé sur la base de l'utilisation de l'IA⁴. C'est donc aussi pour dire que dans le domaine des matériaux, avec un certain décalage par rapport aux domaines de

la biologie, de la pharmacie et de la santé, on veut utiliser des techniques dérivées de l'intelligence artificielle pour accélérer les découvertes de matériaux.

1.2. Les projets en développement

1.2.1. Les projets européens

Il y a des projets européens en cours (Figure 3) comme en Suisse le projet Marvel à l'EPFL⁵, porté par Nicola Marzari, qui a commencé en 2013. Il y a des projets d'initiatives à l'échelle européenne pour le partage des données scientifiques : un projet tout à fait similaire à DIADEM a été lancé en Allemagne en 2020 qui s'appelle FAIRMAT et nous avons beaucoup d'échanges

3. *Materials Acceleration Platform* : Plateforme pour l'accélération sur les matériaux.

4. IA : intelligence artificielle.

5. EPFL : École polytechnique fédérale de Lausanne.

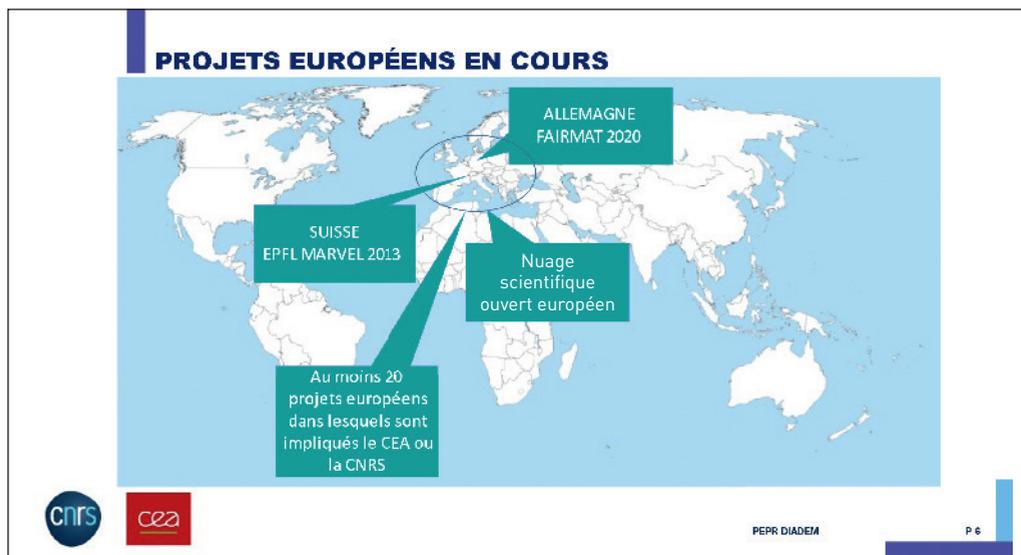


Figure 3

Projets européens en cours.

avec Claudia Draxl qui porte ce projet. Une vingtaine de projets européens, qui pour beaucoup ont à voir avec l'accélération de la découverte des matériaux, dans lesquels le CNRS, le CEA et les universités françaises sont impliqués, ont vu le jour dans la dernière période.

1.2.2. Les projets français

Au niveau national, de nombreuses initiatives préexistaient bien sûr à DIADEM (Figure 4). Nous avons de nombreux GDR⁶, le dernier en date a été lancé en juillet dernier, il s'appelle IAMAT : Intelligence Artificielle pour les Matériaux. Des initiatives ont été prises par le CEA il y a déjà quelques temps à Saclay, à Grenoble, pour la métallurgie combinatoire. Donc tout un panel de

projets et de plateformes de recherches est déjà en cours. DIADEM vient en complément pour essayer de structurer la politique dans ce domaine de recherche et l'un des objectifs est d'essayer de proposer une vision cohérente et une structuration des initiatives en cours.

2 Principes de base du Programme Équipement Prioritaire de Recherche (PEPR) DIADEM

2.1. Lignes directrices et spécificités

Nous avons trois principaux enjeux :

- la découverte accélérée de matériaux pour les grandes transitions : énergétique (batteries filière hydrogène, nucléaire du futur...),

6. GDR : Groupement de recherches.

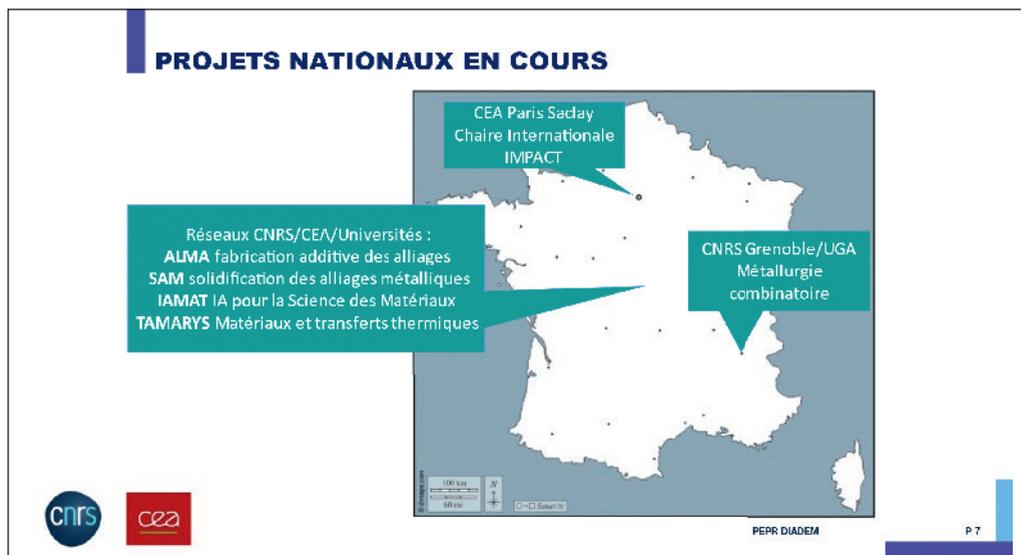


Figure 4

Projets nationaux en cours.

UGA : Université Grenoble-Alpes

environnementale, numérique (électronique...) et sanitaire ;

- la substitution des matières premières critiques et/ou toxiques, qui est un point important de DIADEM, y compris au niveau international ;
- la diversité importante des matériaux et des procédés de mise en œuvre. Donc dans la notion de matériaux, j'insiste sur le fait que la mise en forme, la mise en œuvre, sont des clés pour aboutir à la fonctionnalité. Cela est une spécificité de DIADEM et une complication très importante dans la mise en œuvre de l'intelligence artificielle.

Nos objectifs sont :

- de doter la France d'un réseau de plateformes dédiées à la découverte accélérée des matériaux ;

- ensuite, de mettre à la disposition de la communauté scientifique ces plateformes sous la forme d'appel à projet ;
- et de développer à l'échelle nationale une synergie entre la science des matériaux et l'intelligence artificielle.

2.2. Les différents objets du PEPR DIADEM

1. Les plateformes ont pour objet :

- la conception numérique : à la fois la conception numérique des matériaux et des procédés ;
- la synthèse et la mise en forme à haut débit des matériaux ;
- la caractérisation à haut débit des matériaux ;
- la dernière mais certainement la plus importante pour

notre projet : le lien avec les bases de données et les outils d'intelligence artificielle.

2. Dans un premier temps, nous avons mis en place des démonstrateurs méthodologiques, des projets ciblés, qui ont pour objectif principal la construction des plateformes.

3. Ensuite nous aurons trois vagues d'appels à projets type ANR⁷ pour l'utilisation de ces plateformes et leur ouverture à l'international. Ces appels à projets seront au nombre de 30 à 40, pour une aide comprise entre 800 k€ et 1 M€. Ils seront ouverts à toute la communauté scientifique. Nous avons estimé que le nombre de chercheurs et d'ingénieurs dans le domaine des matériaux

est actuellement de 4 000 en France.

4. De manière complémentaire, la formation est une clé importante, et donc nous mettrons en place des outils de formation et des Écoles internationales.

2.3. Les plateformes de DIADEM

Les plateformes sont distribuées dans le territoire (Figure 5) et sont dédiées à la synthèse, la caractérisation et la modélisation. Il faut noter que les deux synchrotrons⁸ localisés sur le territoire français sont impliqués, ce qui est particulièrement important

8. Synchrotron : appareil électromagnétique de grande taille destiné à l'accélération de particules élémentaires.

7. ANR : Agence Nationale de la Recherche.

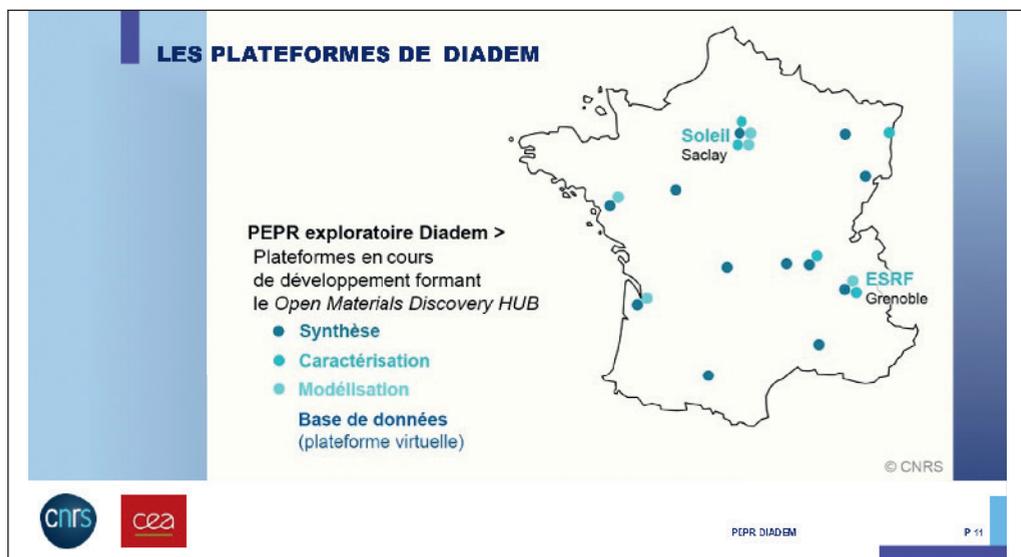


Figure 5

Les plateformes de DIADEM.

Open Materials Discovery HUB : Plateforme ouverte de découverte de matériaux

ESRF (European Synchrotron Radiation Facility) : Équipement européen de radiations synchrotron

quand il s'agit de parler de caractérisation haut débit⁹.

3 Construction et validation des plateformes

3.1. Les projets ciblés de démonstration

La construction et la validation des plateformes se fait sur la base de projets ciblés. La **Figure 6** présente le schéma du DIADEM : au centre, au cœur du programme, figurent les plateformes de design¹⁰ numérique et de caractérisation haut débit. Ce qui est en vert représente la mise en œuvre de la science des données, des bases de données et de l'intelligence artificielle

qui interagit bien évidemment avec toutes les plateformes.

Les projets que vous avez autour et qui complètent le diadème, sont des projets de synthèse et mise en forme haut débit recouvrant une diversité de matériaux et qui sont en cours de mise en place.

Par exemple, vous avez dans ces différents projets, des projets plutôt autour de la métallurgie comme A Dream (voir le chapitre de Stéphane Gorsse, dans cet ouvrage). Vous avez des projets autour des polymères¹¹, des matériaux organiques¹², des matériaux poreux¹³, par exemple

11. Polymère : grosse molécule formée d'une chaîne d'unité de base : le monomère.

12. Matériaux organiques : matériaux composés principalement de carbone et surtout issus des êtres vivants.

13. Poreux : perméable.

9. Caractérisation haut débit : méthode de caractérisation avec un nombre important de données.
10. Design : conception.

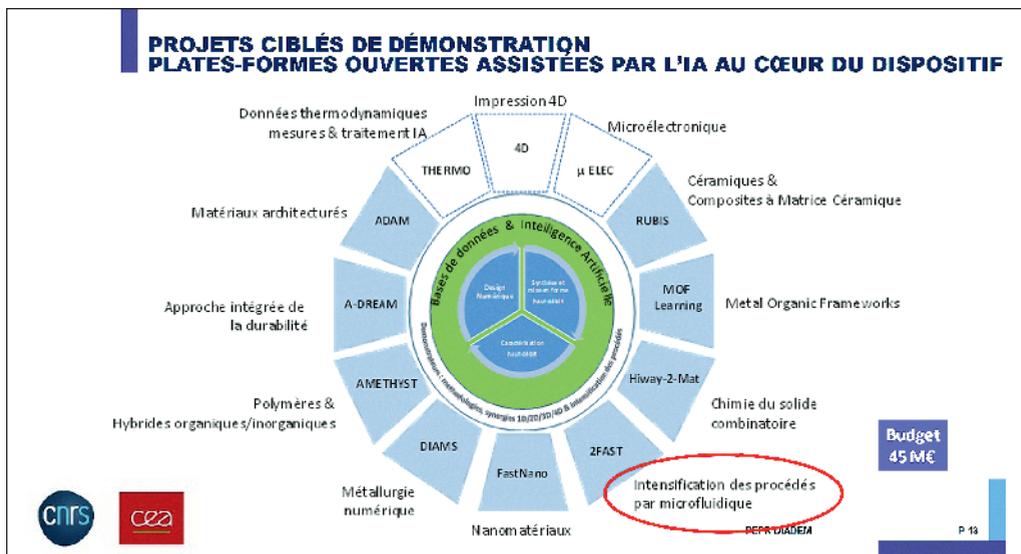


Figure 6

Projets ciblés de démonstration – accent sur l'intensification des procédés par microfluidique.

les MOF¹⁴ (voir le chapitre de François Xavier Coudert qui fait partie de ce projet sur les MOF). Vous avez les projets sur les nanomatériaux¹⁵. L'ensemble de ces projets, soit au total 17 projets, est déjà mis en place.

Je vais maintenant donner quelques exemples, bien évidemment sans être exhaustif.

3.2. Intensification des procédés par microfluidique : projet 2FAST

3.2.1. Principe

Il s'agit d'un projet qui concerne différents laboratoires, dont le LOF¹⁶ avec la société Solvay. Il s'agit de fabriquer, sur quelques centimètres carrés, des réacteurs dans lesquels vous allez avoir à certains endroits de ce réacteur un mélange et une réactivité entre différents précurseurs chimiques¹⁷ sous forme liquide (**Figure 11**). Ensuite, ces réacteurs microfluidiques¹⁸ génèrent des gouttelettes (ici en bleu), et chacune de ces gouttelettes est un réacteur liquide. Dans chacun de ces réacteurs, on va pouvoir changer de manière très contrôlée et de manière « très haut débit », la synthèse de différents matériaux. Donc

14. MOF (*Metal Organic Frameworks*) : réseaux organométalliques.

15. Nanomatériaux : matériaux à l'échelle du nanomètre (10^{-9} mètres).

16. LOF (*Laboratory of Futur*) : Laboratoire du futur.

17. Précurseurs chimiques : éléments initiaux à partir desquels une réaction chimique peut être réalisée.

18. Microfluidique : techniques de réactions dans des micro canaux (de l'ordre ou inférieur au millimètre).

la première étape est la synthèse haut débit.

3.2.2. Caractérisation en ligne

Un point très important qui va revenir dans tous les projets de DIADEM, est d'avoir une détection en ligne pendant que la synthèse se réalise. C'est sur le schéma de droite de la **Figure 7**, la condition pour avoir ce qu'on appelle un réacteur orchestré.

Nous avons différentes spectroscopies et différentes méthodes d'analyse en ligne qui génèrent des données. Dans cet exemple, cela peut être des données optiques, des données de spectroscopie¹⁹, par exemple Raman, des données plus structurales, par exemple de diffusion de rayon X aux petits angles, qui génèrent ces données, et l'objectif est d'utiliser l'intelligence artificielle comme un outil d'orchestration du procédé et d'optimisation de la réactivité en fonction des données qui sont produites en ligne.

3.2.3. Laboratoire autonome

Un objectif important est que cette intelligence artificielle en ligne puisse interagir avec le protocole de la réaction. On a ce que les Américains appellent les « *Materials Acceleration Platforms* », un laboratoire autonome, en l'occurrence ici, un laboratoire fluide autonome où la boucle de rétroaction est automatisée. Donc on peut avec toute cette boucle, si on a bien entraîné l'intelligence artificielle et bien mis en

19. Spectroscopie : étude des spectres électromagnétiques issus de matériaux pour étudier leur émission ou absorption d'énergie suite à une excitation (par de la lumière par exemple).

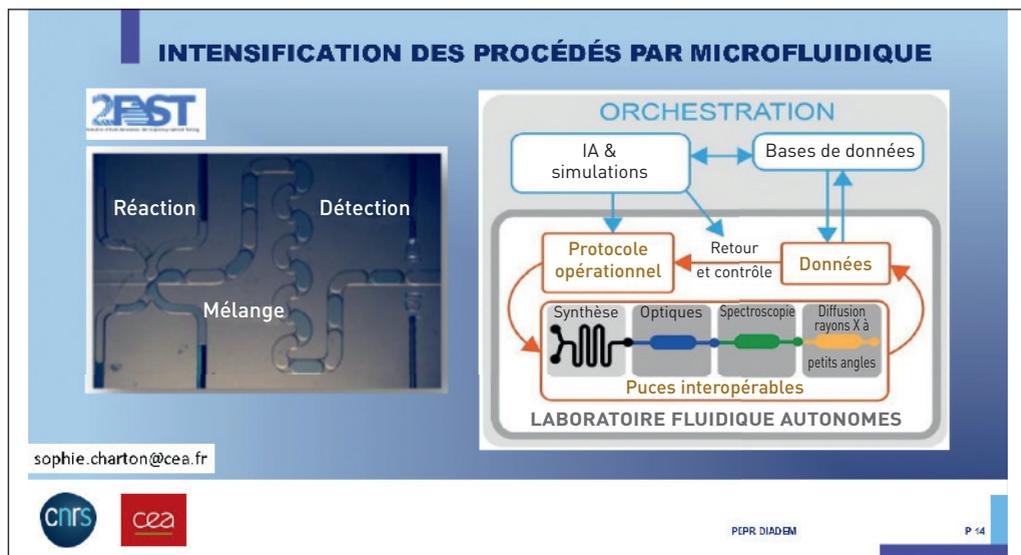


Figure 7

Intensification des procédés par microfluidique.

place les approches d'apprentissage, avoir une rétroaction en direct sur le processus de synthèse. On comprend bien ici l'importance de l'utilisation de l'intelligence artificielle.

Laboratoire autonome, IA, orchestration, base de données, sont tous des mots clés importants, et l'idée des collègues qui portent ce projet est d'orchestrer cet ensemble et de mettre en place les différentes briques pour le construire.

3.3. Un projet de couches minces : Hiway-2-Mat

Le deuxième exemple concerne la chimie du solide combinatoire²⁰ (Figure 8) au

sein du projet Hiway-2-Mat. Là on parle de synthèse haut débit combinatoire. Il y a différentes manières de procéder, je vais en décrire une ou deux.

3.3.1. Conception des matériaux

La Figure 9 présente un exemple d'un substrat de quelques centimètres carrés avec trois composés A, B, C. Quand on fait des solutions solides²¹ entre ces trois composés, les caractérisations de ces composés peuvent prendre de nombreux mois. Le matériau qui est concerné ici est un matériau qui peut être utilisé pour les piles à combustibles²² et les électrolyseurs

20. Chimie combinatoire : méthodes de réactions chimiques mettant en place un grand nombre de réactions entre des composés A et B (et parfois C) en faisant varier leurs concentrations.

21. Solution solide : mélange de deux corps purs formant un solide homogène.

22. Pile à combustible : générateur de courant par des réactions d'oxydo-réduction.

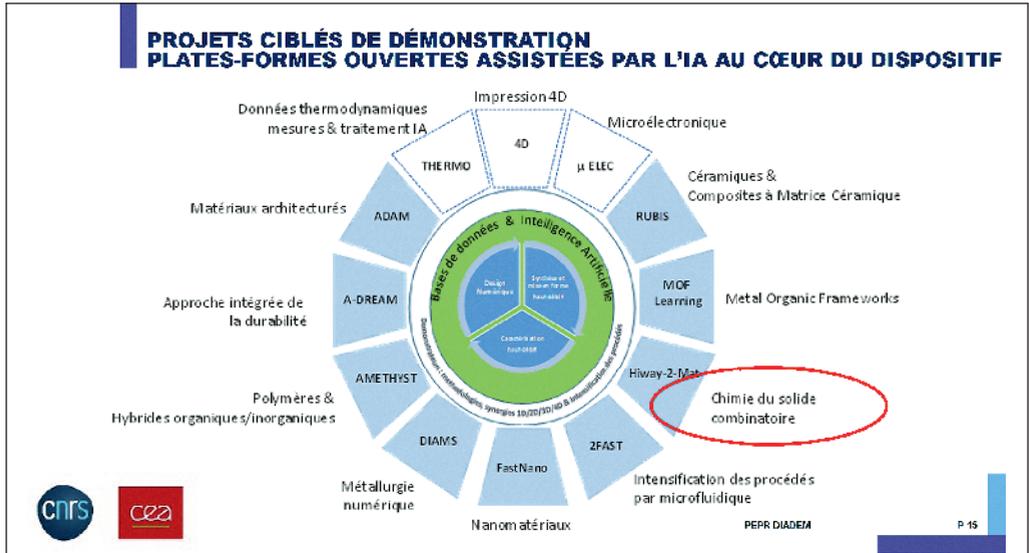


Figure 8
Projets ciblés de démonstration – accent sur la chimie du solide combinatoire.

CHIMIE DU SOLIDE COMBINATOIRE: COUCHES MINCES

Un diagramme ternaire sur quelques centimètres carrés [G. Dezanneau, à paraître]

Dépôt physique en phase vapeur.

guilhem.dezanneau@centralesupelec.fr

Figure 9
Chimie du solide combinatoire : couches minces.

pour la filière hydrogène, et vous avez ici les trois sommets du triangle du diagramme ternaire pour lequel X représente l'étain, le zirconium et le cérium. Vous avez une continuité de composition chimique sur un même substrat de quelques centimètres carrés.

Cette première étape a été réalisée par une technique dérivée de la PVD « pulvérisation cathodique ». En fait, c'est une technique qui a un gros inconvénient : elle génère des gradients. C'est-à-dire que dans les dépôts sur une grande surface réalisés à partir de cette technique de dépôts, la composition n'est pas fixe en fonction de la position sur le substrat. C'est un gros inconvénient, mais les collègues qui l'ont mis en œuvre ont tiré parti de ces gradients pour avoir un panel de composition continu sur un même substrat. C'est la première étape, il va falloir maintenant analyser les caractéristiques importantes, les descripteurs qui pourront être inclus dans la boucle d'intelligence artificielle.

3.3.2. Analyse des propriétés locales/globales

Si on s'intéresse à la structure des matériaux, quand on balaye la composition, la structure change, mais aussi les propriétés fonctionnelles, en l'occurrence la conductivité ionique. C'est une propriété qui n'est pas locale, donc le challenge²³ c'est d'aller regarder à l'échelle locale sur le substrat, aux différents endroits du substrat, comment varie la conductivité. Donc c'est aussi ce qu'il va falloir mettre en place dans

ce projet. Cette machine pour le faire actuellement n'est pas disponible en France, le résultat rapporté ici a été obtenu à l'Université de Barcelone. Le projet dans DIADEM est de monter une machine similaire qui va être déployée au CEA Tech Bordeaux.

3.4. Un projet de fabrication de poudre Hiway-2-MaT

3.4.1. Automatisation parallèle

L'objectif dans ce second projet de Hiway-2-MaT (*Figure 10*) est de fabriquer des poudres. Il faut automatiser notre réacteur et notre réaction chimique, les caractérisations structurales, les caractérisations fonctionnelles éventuellement locales et l'analyse des données. On peut automatiser et robotiser ces quatre étapes qui peuvent être faites en parallèle.

3.4.2. Boucle autonome

Mais ensuite il s'agit de combiner toutes ces approches et c'est là qu'on rentre vraiment dans le laboratoire autonome et dans l'utilisation de l'intelligence artificielle pour avoir une boucle qu'on appelle la boucle autonome qui, à partir des données qui sont produites, peut optimiser la préparation, la synthèse des matériaux en l'occurrence. Bien évidemment, si en plus dans cette boucle on arrive à inclure la modélisation, par exemple la modélisation type DFT²⁴, et si on gère les données de manière reproductible et accessible, on peut peut-être inclure cette boucle d'optimisation par modélisation, et donc

24. DFT : théorie fonctionnelle de la densité, méthode de modélisation.

23. Challenge : défi.

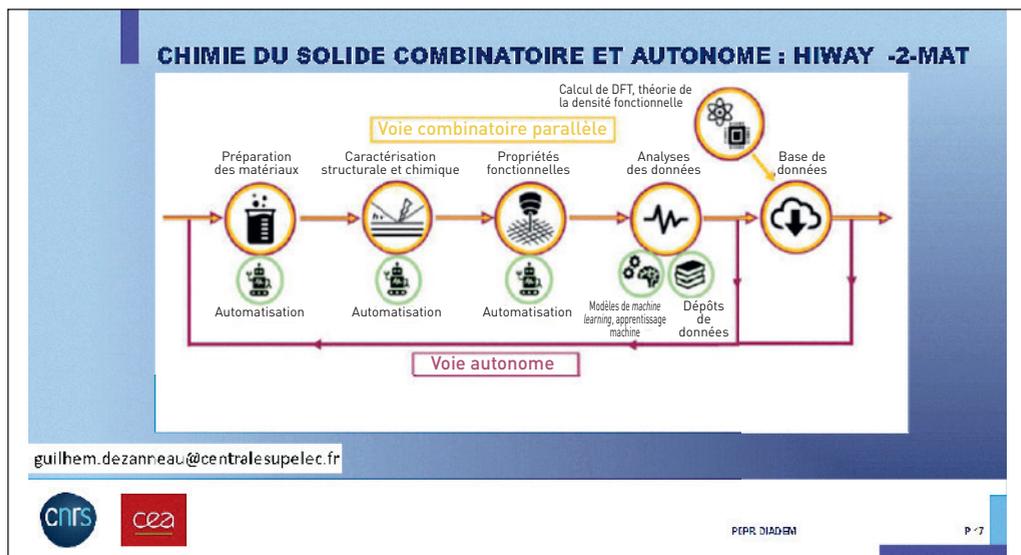


Figure 10

Chimie du solide combinatoire et autonome : Hiway-2-Mat.

on aura un laboratoire autonome expérimental qui en plus sera connecté directement à la modélisation.

Donc il y a beaucoup d'éléments technologiques à mettre en place, et en l'occurrence la robotique va jouer un rôle très important, mais également la science des données. Il faudra que l'ordinateur soit capable de caractériser le composé X, Y que j'ai voulu synthétiser. Je fixe un critère, par exemple la raie de diffraction 100 du composé, et l'ordinateur devra être capable de dire en fonction des paramètres de synthèse si on s'approche ou pas du composé cristallisé qu'on voulait faire.

3.5. Un projet de microélectronique : μ ELEC

Le dernier exemple que je voulais montrer concerne la microélectronique (Figure 11).

3.5.1. Conception des substrats

C'est un projet plus récent de DIADEM. Il s'agit aussi d'une technique de dépôt couche mince, donc ici de l'ablation laser combinatoire, où, en utilisant un laser et en pulvérisant des cibles différentes, les collègues ont été capables de réaliser sur un substrat, ici c'est sur quelques centimètres carrés, 600 échantillons. Ce dispositif est disponible depuis plusieurs années au GREMAN à Tours (Figure 12). On voit ici ce qu'on appelle les condensateurs²⁵, les petits rectangles sont des électrodes, et chacun de ces composants peut être testé individuellement du point de vue de sa structure et du point de vue de sa fonctionnalité. Ici il s'agissait

25. Condensateur : composé électronique permettant de stocker des charges.

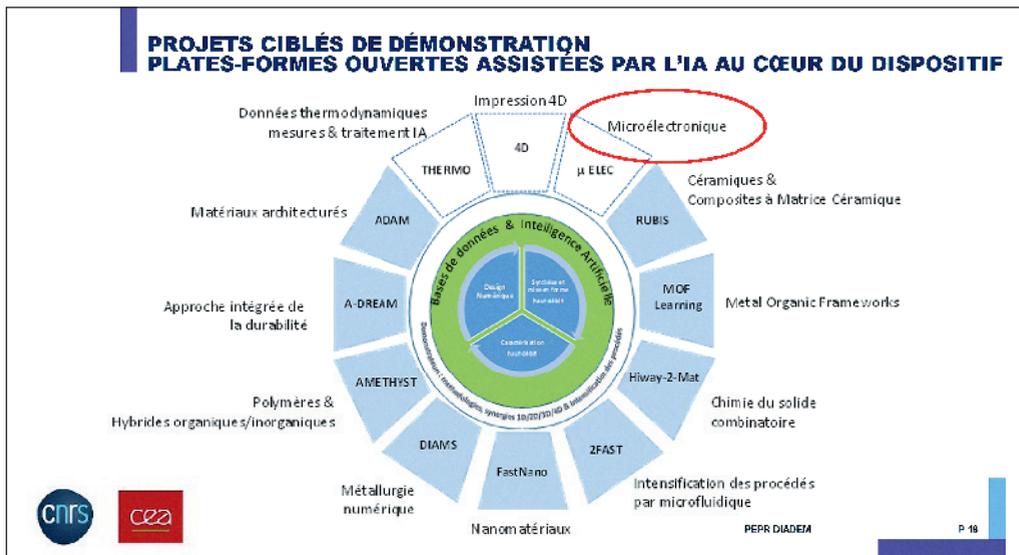


Figure 11
Projets ciblés de démonstration – accent sur la microélectronique.

COUCHES MINCES POUR LA MICROÉLECTRONIQUE

Ablation laser combinatoire

12 compositions identiques

50 compositions différentes (Ba,Ca)(Ti,Zr)O₃

600 échantillons sur quelques cm²

wolfman@univ-tours.fr

PEPR DIADEM

P 18

Figure 12
Couches minces pour la microélectronique.

d'une pérovskite contenant du baryum, du calcium, du titane et du zirconium. Le long de l'axe horizontal, c'est la composition en zirconium qui change de manière systématique, donc vous avez 50 compositions le long de l'axe horizontal, et le long de l'axe vertical vous avez une douzaine de compositions qui sont toutes les mêmes, ce qui autorise, en plus, de pouvoir faire de la statistique. Voyons les résultats obtenus.

3.5.2. Résultats des caractérisations

On peut faire une caractérisation structurale et

fonctionnelle. Ici nous avons le diagramme ternaire (**Figure 13**), BaZrO_3 , BaTiO_3 , CaTiO_3 , et vous pouvez balayer des lignes dans ce diagramme ternaire qui se traduit par ces différents échantillons. Vous avez des nappes de fonctionnalité dans cet espace qui est complexe, vous voyez la composition qui varie ici, vous pouvez ajouter un paramètre – ici en l'occurrence c'était le champ électrique – et vous avez votre fonctionnalité qui change de manière systématique en fonction de la composition et d'autres paramètres.

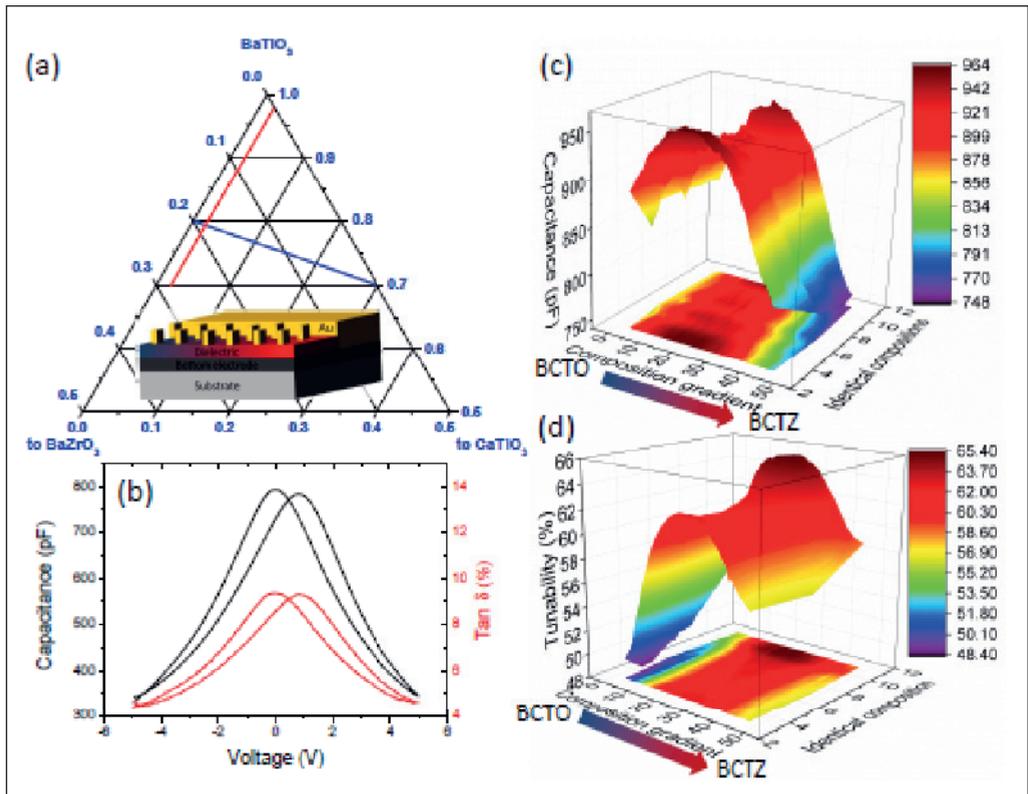


Figure 13

Résultats pour la microélectronique.

Jusqu'à présent le traitement de ces données se faisait à la main, à partir de tableaux Excel qui contenaient un nombre très conséquent de données, et donc l'objectif du projet c'est d'automatiser complètement le travail de traitement de ces données pour optimiser, se retrouver près de la courbe maximale qui concerne ici un maximum de propriétés piézo-électriques de ces matériaux. Le travail long et ingrat qui avait été fait pour optimiser ces matériaux peut être fait de manière totalement automatisée.

(Figure 14) des 4 000 personnes impliquées au niveau national, pas seulement dans DIADEM, mais des 4 000 chercheurs et ingénieurs en France qui sont focalisés sur les thématiques d'accélération de la découverte des matériaux. Donc la formation sera importante, mais pas que dans la formation initiale, il s'agira de mettre en place une formation continue, et de mettre en place un vrai changement de la culture scientifique des collègues impliqués dans la science des matériaux.

4 Déroulement du programme : formations et AAP

4.1. Formations

Le déroulement du programme commence par la formation

4.2. Budget

Des initiatives seront prises ; on a doté ce programme de trois millions d'euros sur huit ans pour développer des formations initiales et continues dans le domaine de l'accélération de la découverte des matériaux.

FORMATION

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€

impact

cnrs **cea**

PEPR DIADEM P 22

Figure 14

Développement d'outils de formation.

4.3. Universités partenaires

Des universités sont partenaires (Figure 15) du CNRS et du CEA qui sont les porteurs du projet. Il y a sept universités partenaires dont trois sur la région parisienne : Paris Saclay, Sorbonne Université et Institut Polytechnique de Paris, ainsi que les Université de Lorraine, de Lyon, Université Grenoble-Alpes et l'Université de Bordeaux. Sont aussi impliquées les deux grosses infrastructures de recherche que sont les deux synchrotrons ESRF et SOLEIL. Les plateformes ne sont pas toutes localisées sur les sites universitaires, mais dans les endroits les plus pertinents.

4.4. Déroulement du projet

Ces 17 projets ciblés du programme DIADEM (Figure 16)

vont se dérouler entre maintenant et 2025-2026. Les plateformes qui sont en cours de mise en place vont se développer pendant toute la durée du projet. Par exemple, la plateforme numérique va monter en régime entre maintenant et la fin du projet en 2029-2030.

À partir de 2024, les plateformes mises en place seront ouvertes à toute la communauté scientifique sous forme d'appels à projets dédiés dont la thématique principale sera l'accélération de la découverte de matériaux grâce aux techniques d'intelligence artificielle, et tout au long du programme nous y associerons un programme de formation.

L'objectif est qu'en 2030, les plateformes soient en place et soient le plus possible utilisables par toute la communauté académique mais aussi industrielle.



Figure 15

Universités partenaires et grandes infrastructures.

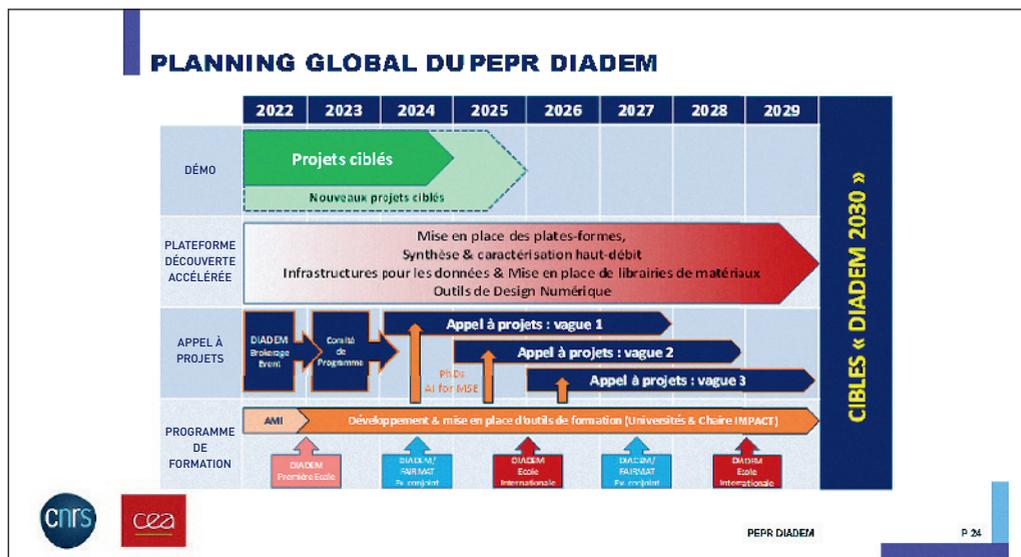


Figure 16
 Planning global du PEPR DIADEM.

Conclusion

La **Figure 17** montre la photo des 14 projets ciblés qui ont déjà démarré. L'objectif est de découvrir de nouveaux matériaux dans différents domaines, de manière complètement diversifiée grâce à l'intelligence artificielle. Nous revendiquons la diversité des projets car nous voulons montrer qu'approcher une grande diversité de matériaux, c'est le moyen de montrer que l'intelligence artificielle contribue effectivement à la découverte accélérée des matériaux.

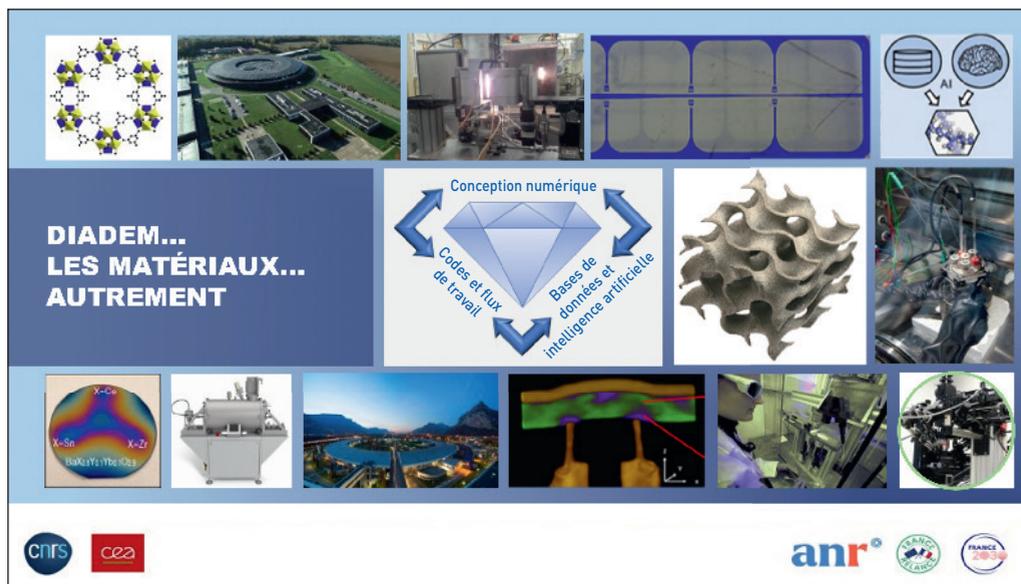


Figure 17

Conclusion : DIADEM... Les matériaux autrement...