

CARMEN



Evolution

Claire-Marie Pradier:

***Passionnant !***

# CARMEN



# Evolution

“Ministère” – Lionel Moulin

- Grand portefeuille de moyens d'action
- D'une recherche disciplinaire à une recherche orientée objet
- Sciences de la “durabilité”
- Appropriation par la public: Q & A

CARMEN



Evolution

IFPEN – Hélène Olivier

- Réorientation profonde
- “Matériaux” transverse aux enjeux
- De la découverte accélérée à l’up-scaling

TotalEnergies – Eric Chaput

# CARMEN



# Evolution

CNRS – Abdou Slaoui

- Solaire et biomasse
- SHS: “La fabrique du consentement”? Non!
- Garder du bas TRL!

# CARMEN



# Evolution

**ANCRE** - Christel Laberty

- Recherche de concepts en rupture
- Sciences de base pour l'énergie (non objectivée)
- Procédés de fabrication innovants: (aussi réversibles ?)
- Science de base pour la chaleur

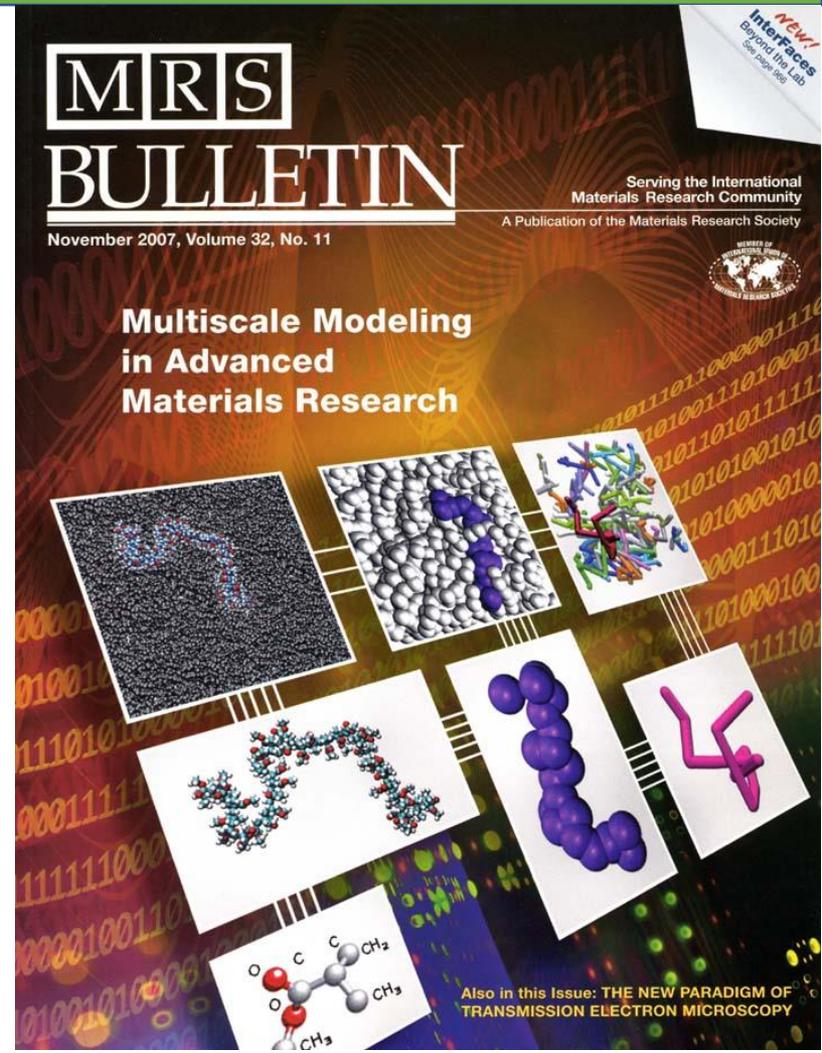
# CARMEN



# Evolution

SOLVAY – Lauriana D'Alençon

- Fédérer les compétences
- Maîtriser la chimie de surface des poudres
- Interfaces réactives
- Problèmes multiéchelles



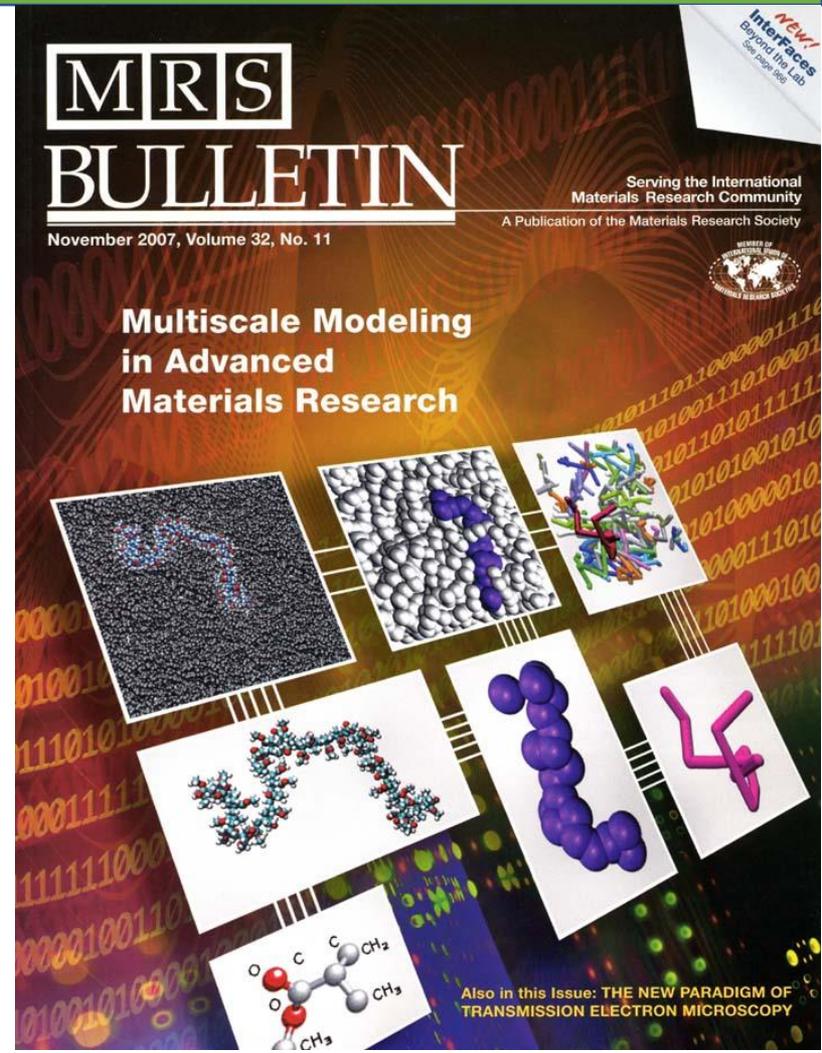
# CARMEN



# Evolution

Saint-Gobain – Emmanuelle Gouillard

- Transferts de chaleur et d'humidité
- Défi: laine de verre
- Recyclage: stimuli pour la déconstruction
- Problèmes multiéchelles (plaque de plâtre)



# CARMEN



# Evolution

**ENWIRES** – Olga Burchark

- Faites du saut à l'élastique!
- Demander à Saint-Gobain de faire de la laine de Si-graphite?

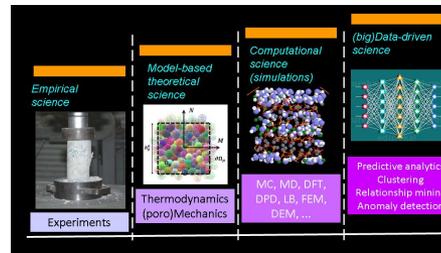
# CARMEN



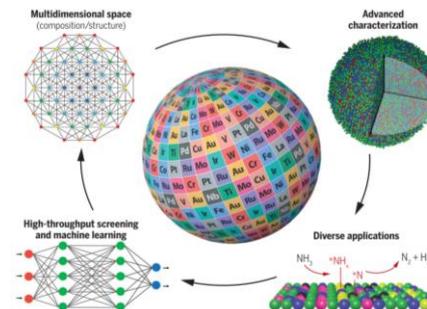
# Evolution

## CEA – Fany Dalbaud - Découverte accélérée de matériaux

☐ (Small) Data-driven discovery



☐ Métallurgie combinatoire



# CARMEN

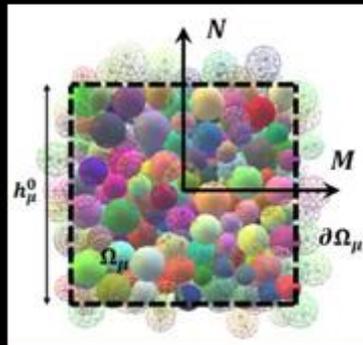
# Evolution

Empirical science



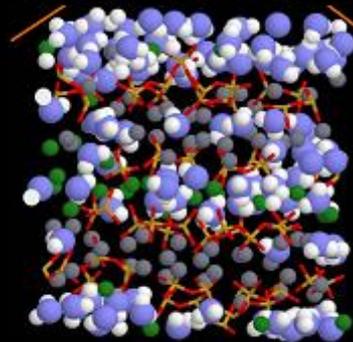
Experiments

Model-based theoretical science



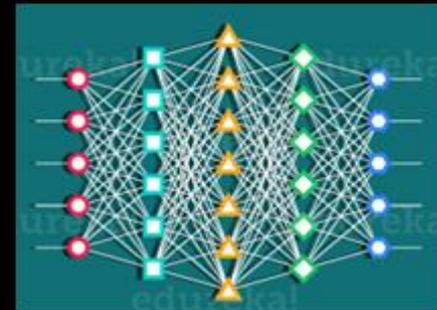
Thermodynamics  
(poro)Mechanics

Computational science  
(simulations)



MC, MD, DFT,  
DPD, LB, FEM,  
DEM, ...

(big)Data-driven science



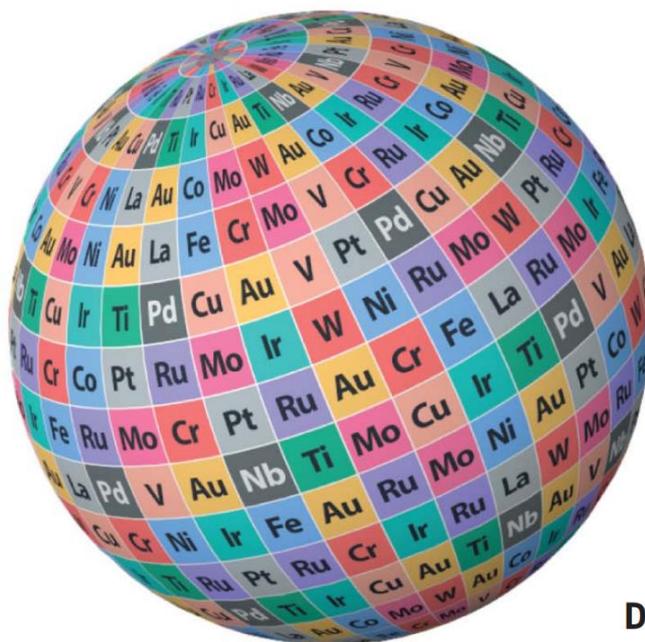
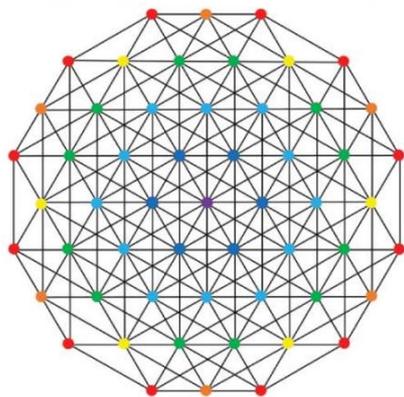
Predictive analytics  
Clustering  
Relationship mining  
Anomaly detection

# CARMEN

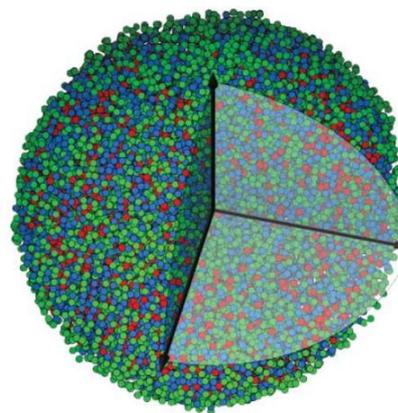


# Evolution

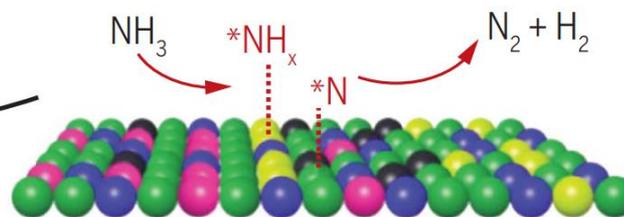
**Multidimensional space**  
(composition/structure)



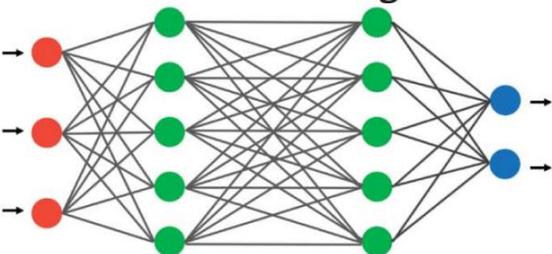
**Advanced characterization**



**Diverse applications**



**High-throughput screening and machine learning**



Y. Yao et al., High-entropy nanoparticles: Synthesis-structure-property relationships and data-driven discovery, *Science*, 376, 151 (2022)

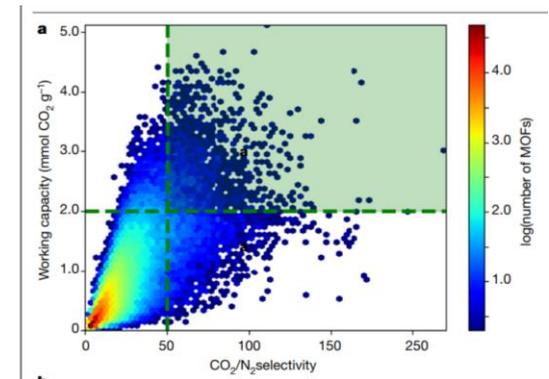
# CARMEN



# Evolution

## Christian Serre – Défis pour les Matériaux Hybrides Fonctionnels

- ❑ Développements techniques (RMN DNP, Microscopie, ...)
- ❑ Composites
- ❑ Prédiction structurelle
- ❑ Haut débit? Oui, mais avec caractérisation structurelle et prédiction des propriétés



# CARMEN



# Evolution

Patrice Simon – RS2E Matériaux pour le Stockage Electrochimique

- Bilan remarquable
- Spectre très large (Nouvelles chimie, autoréparation, écoconception, recyclage, digital twins, ...)
- Formation, y compris professionnelle

CARMEN



Evolution

Eric Marceau– **Matériaux pour la catalyse**

- Economie de la synthèse (critère de rendement en metal utile? LCA)
- Analyse locale: hétérogénéités? Méthodes?
- Représentativité? Temps? Coût? Valeur ajoutée?
- Stabilité: en phase liquide; en conditions de reaction.



## David Farrusseng – Adsorbants: enjeux scientifiques et technos

- ❑ MOFs: un tsunami sub-TRL8!
- ❑ Trouver la “MOF-Faujasite” qui réunira la combinaison matériau-marché “magique”
- ❑ (Il peut être très utile d’être présent dans les instances normatives...)
- ❑ Besoin fondamental: savoir prédire correctement les propriétés (adsorption en mélange, transport)
- ❑ Besoin techno: mise en forme sans dégradation des performances

CARMEN



Evolution

Sophie Carencó –

## Spectroscopie et microscopie pour l'étude de nanoparticules réactives

(mariés au premier regard?)

- ❑ Augmenter l'activité pour se passer d'Arrhénius et changer la sélectivité
- ❑ Comment? Exacerber la réactivité de surface en maîtrisant la chimie de coordination de surface (ex: paires de Lewis frustrées) (pas de la catalyse homogène supportée, mais presque...)

CARMEN



Evolution

Vivement demain !

CARMEN



Evolution

***Quelle belle boîte à outils !***

# CARMEN



# Evolution

## SPECTROS X - Valérie Briois

- ❑ Analyse multivariée: EPR / SPECTROS X/ UV-vis / ATR-IR operando !!
- ❑ Transport: de 500s/im à 11s/im, de 200 $\mu$ m à 16 $\mu$ m
- ❑ Multi length scale imaging: nm à  $\mu$ m, ps (?) à s
- ❑ Visualisation des cmaps de deformation à l'échelle d'une particule unique

# CARMEN



# Evolution

## MICROSCOPIE X (mous) – Rachid Belkhou

- Faster, Smaller, More efficient!
- De nombreux atouts! (tous éléments, resolution, spectroscopie + microscopie, “fenêtre de l’eau”)
- Permet la spectro X à l’échelle nano
- Utiliser avantage la polarisation!



## Microscopie électronique 1 et 2 – Christian Ricolleau, Ovidiu Ersen

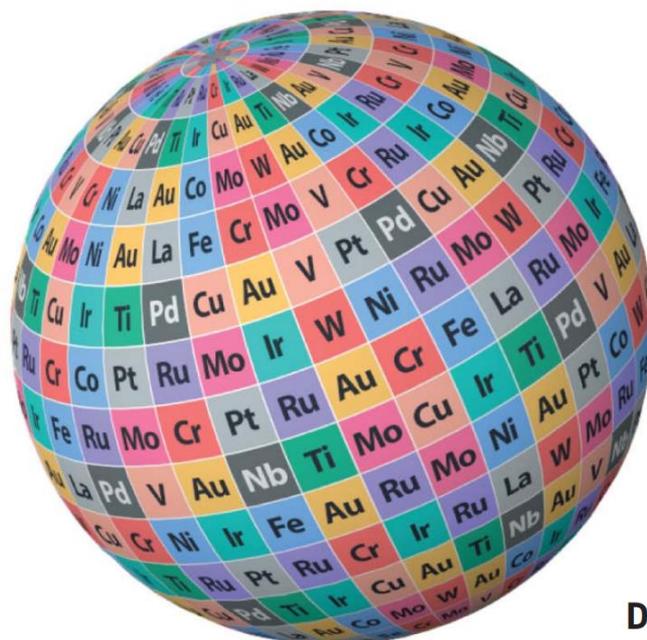
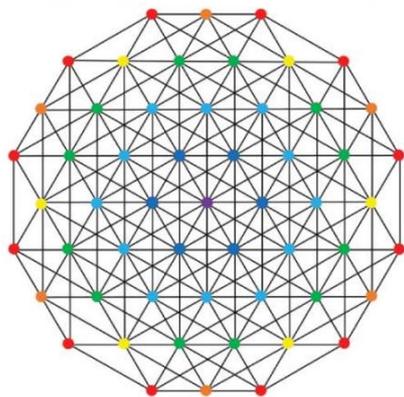
- ❑ La course à la resolution a cédé la place à la course à l'info
- ❑ In situ: beaux exemples: zeolites, chemical looping catalysts, clay/SiO<sub>2</sub>
- ❑ Operando: superbe exemple, mais ce sera encore mieux avec de meilleures cellules
- ❑ HEA: pas si homogènes que ça... Quels potentiels?
- ❑ Approches corrélatives: (1) nucleation-croissance par MET-RMN hyperpolarisée (2) perovskites hybrides par MET-EXAFS
- ❑ Futur: mouvement Brownien; couplage avec DLS

# CARMEN

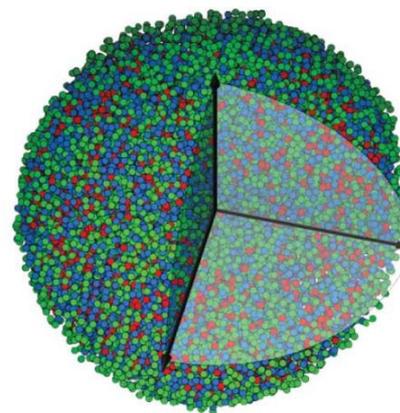


# Evolution

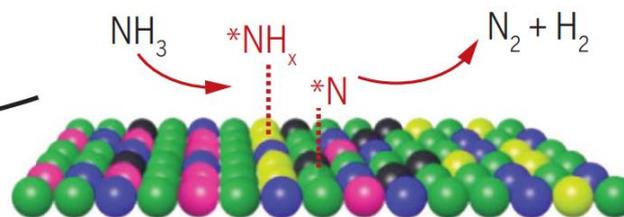
**Multidimensional space**  
(composition/structure)



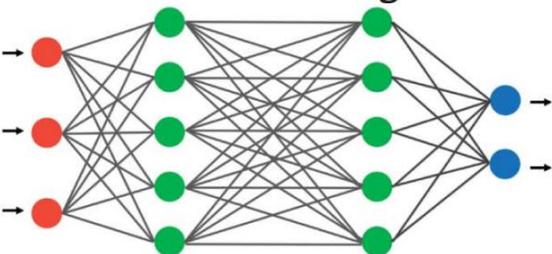
**Advanced characterization**



**Diverse applications**

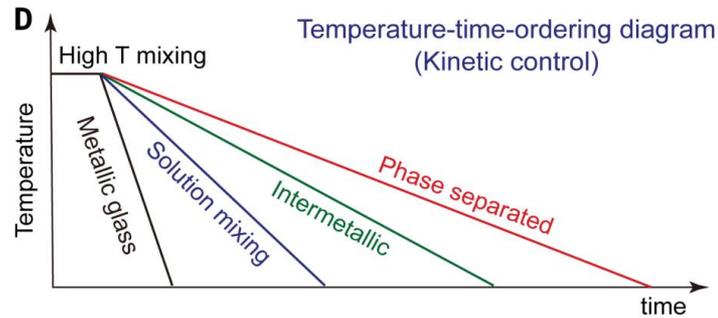
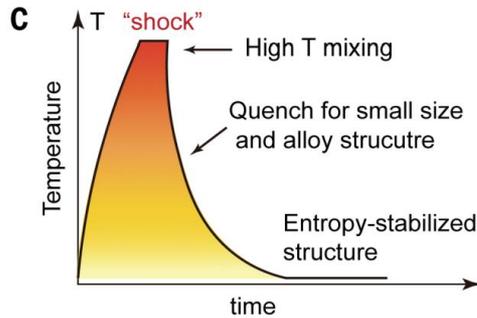


**High-throughput screening and machine learning**

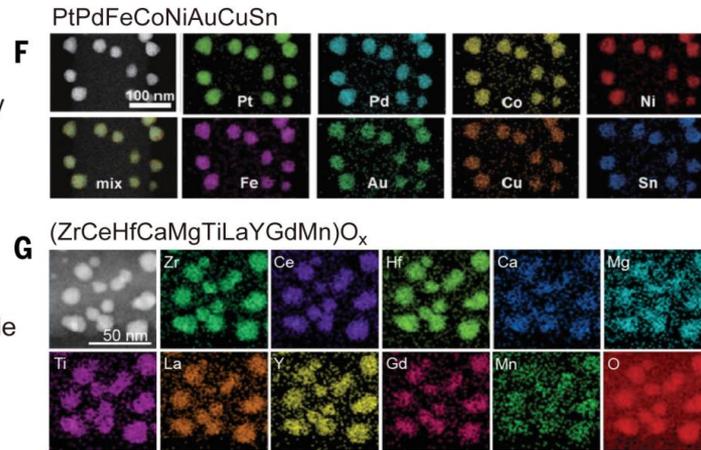
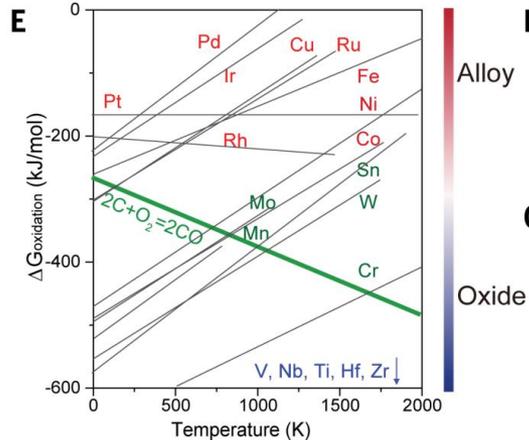


Y. Yao et al., High-entropy nanoparticles: Synthesis-structure-property relationships and data-driven discovery, *Science*, 376, 151 (2022)

## Synthesis effect



## Ellingham diagram guide



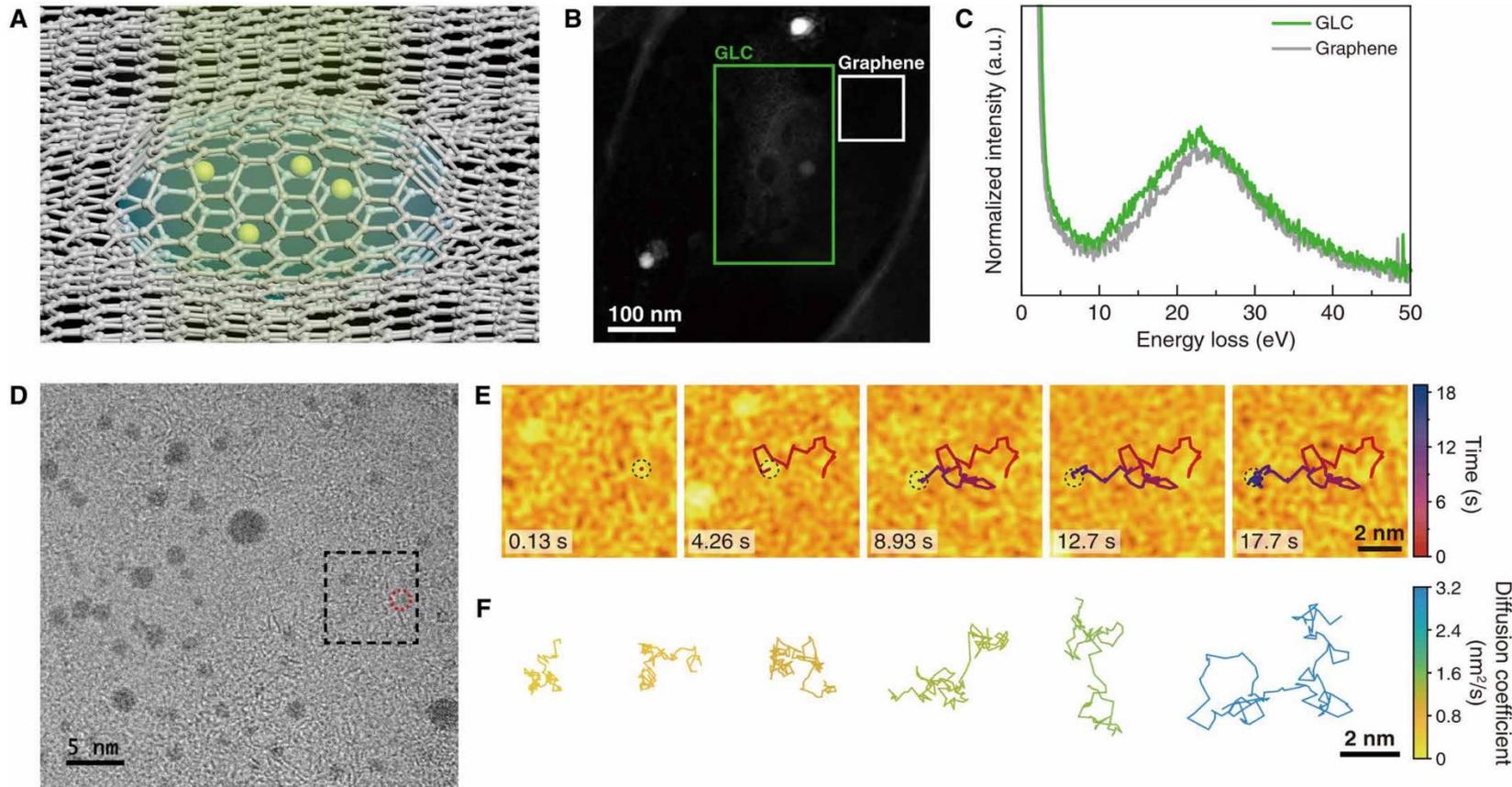
**Fig. 2. High-entropy nanoparticle synthesis and structure.** Thermodynamic analysis of high-entropy mixing considers both entropy (A) and enthalpy (B), which are mainly determined by the composition of high-entropy nanoparticles (8). (C) Thermal shock synthesis of high-entropy nanoparticles features a high-temperature pulse for elemental mixing and then rapid temperature quenching to maintain the high-entropy structure. (D) Temperature-time-transformation diagram describing how the cooling rates of high-temperature,

kinetically controlled syntheses can be adjusted to form various nanoparticles featuring different degrees of structural and chemical ordering. (E) The Ellingham diagram [reprinted from (14) with permission from Elsevier] provides a guide for composing either alloy (e.g., PtPdFeCoNiAuCuSn) (8) (F) or oxide high-entropy nanoparticles (e.g.,  $\text{ZrCeHfCaMgTiLaYGdMnO}_x$ ) (20) (G) according to the oxidation potentials of each element. Reprinted from (20) with permission from Springer Nature.

# CARMEN



# Evolution



S. Kang et al.,  
Real-space  
imaging of  
nanoparticle  
transport and  
interaction  
dynamics by  
graphene liquid  
cell TEM, *Sci.*  
*Adv.* 7,  
eabi5419, 2021

CARMEN



Evolution

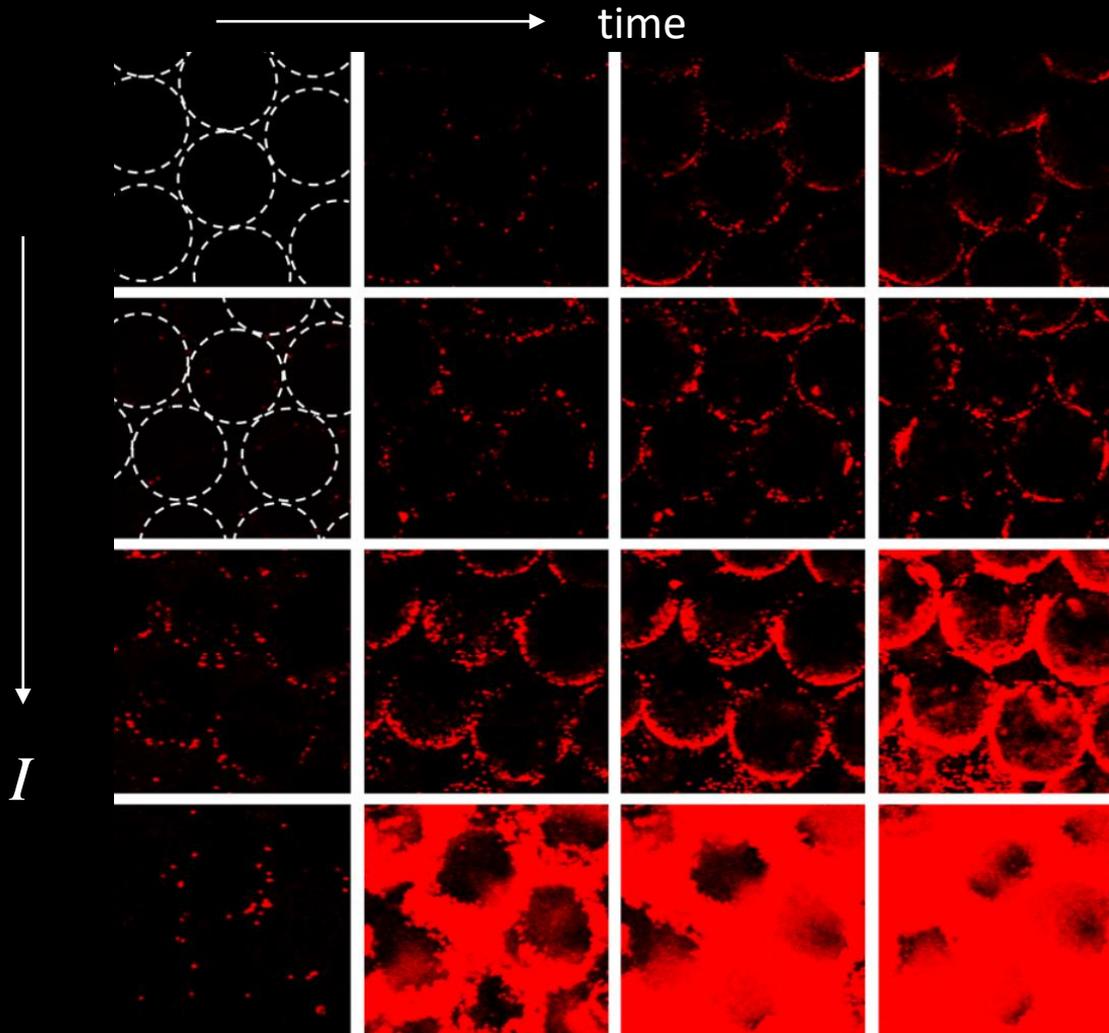
## Transport colloidal en milieux poreux – Pierre Levitz

- ❑ XPCS: “DLS-X”
- ❑ XDDM: “Corrélation d’images de radiographie”
- ❑ Du synchrotron au labo ?

# CARMEN



# Evolution

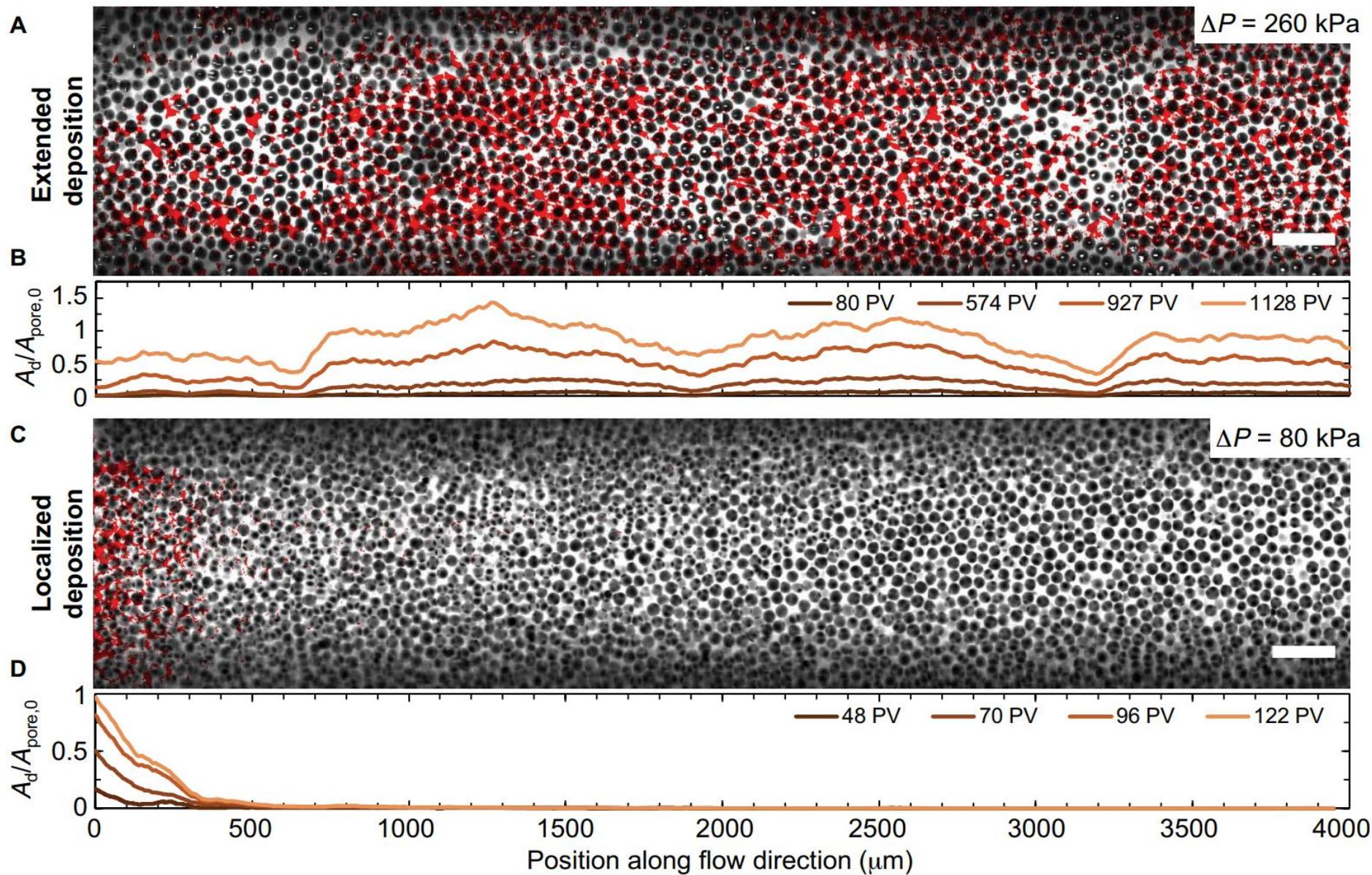


G.Gerber, M. Bensousa, D.A. Weitz & P. Coussot, Self-Limited Accumulation of Colloids in Porous Media, PRL, (2019) 123(16), 158005

# Multiscale dynamics of colloidal deposition and erosion in porous media

Navid Bizmark<sup>1,2</sup>, Joanna Schneider<sup>2</sup>, Rodney D. Priestley<sup>1,2</sup>, Sujit S. Datta<sup>2\*</sup>

N. Bizmark et al., Multiscale dynamics of colloidal deposition and erosion in porous media, *Sci. Adv.* 2020, 6, eabc2530



# CARMEN



# Evolution

RMN – Franck Fayon – Anne Lesage – Andrew Pell

- Les points forts restent forts
- Les points faibles ne le sont plus  
(sensibilité, imagerie solide (très hauts champs, très hautes vitesses, DNP)
- Surface, bulk, milieux hétérogènes (pseudo-cristallo RMN)

**CARMEN**



**Evolution**

RMN: relaxométrie, PFG, forme de raie, IRM – Jean-Christophe Perrin  
Application aux membranes de PEMFC - Nafion

# CARMEN



# Evolution

## RPE – Hervé Vezin

- L'époque "historique" est vraiment terminée!
- Progrès énormes liés à la RPE impulsionnelle et à l'imagerie
- Cokage, Cyclage des batteries, nucleation-croissance des dendrites de Li...
- And more to come !

# CARMEN



# Evolution

## Spectroscopies vibrationnelles – Arnaud Travert

- ❑ Des cellules, des cellules... (in situ, automatisées, operando P et T, photocat,...)
- ❑ Couplages IR-TGA, IR-DSC, ...
- ❑ Evolution de spectres complexes: méthodes de deconvolution spectrale et temporelle (ou énergétique) – Besoin de robustesse
- ❑ Game changers (1) lasers accordables IR, sources supercontinuum (2) data processing (3) tout adapter au haut debit.



## Chimie théorique pour les catalyseurs hétérogènes – Céline Chizalet

- DFT et spectro X (+TEM): un couple gagnant
- Rôle des arrêtes du support sur la localisation des NP (thermo ou cinétique?)
- Les surfaces externes des cristaux de zéolithes sont sources de sites acides spécifiques (B ou L)
- La DFT peut même se révéler utile pour comprendre les phénomènes liés à la mise en forme!
- Besoin de potentiels réactifs (par ML?)

CARMEN



Evolution

Statistical physics methods for bridging length and time scales in porous materials – Roland Pellenq

A

B

C

D

E

CARMEN



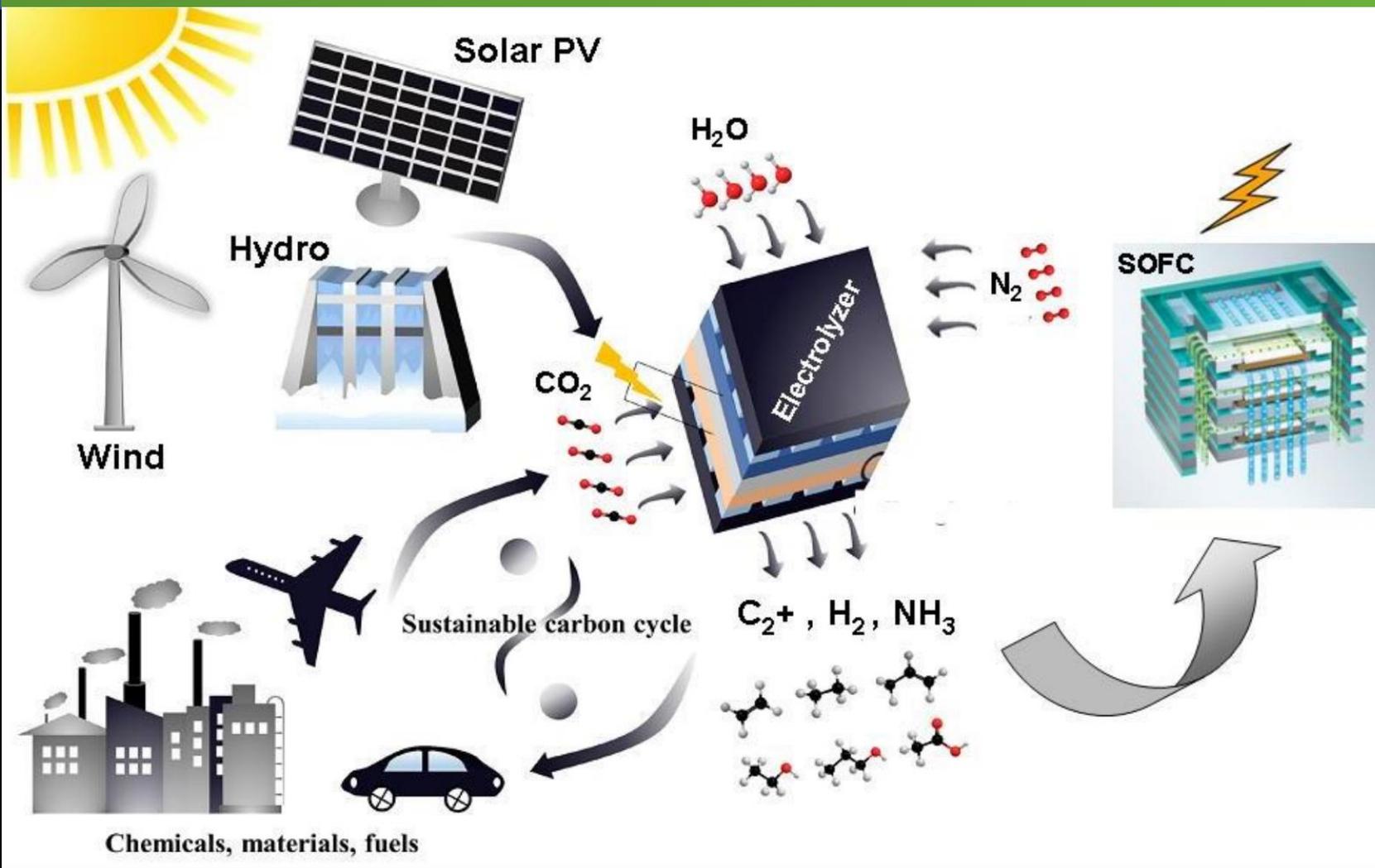
Evolution

***Il reste à faire le lien avec la boîte à questions !***

# CARMEN



# Evolution



L. Fan, Ch.  
Xia, F. Yang, J.  
Wang, H.  
Wang, Y. Lu,  
2020, Sci.  
Adv., 6,  
eaay3111.

# CARMEN



# Evolution

Claire-Marie Pradier:

- Remarquable synergie entre les besoins/enjeux, approche des académiques, industriels et EPICs bien sûr !!! C'est étonnant de voir qu'en recherche ces acteurs se posent les mêmes questions et misent sur une remarquable continuité entre recherche fondamentale et innovations
- On remarque le grand nombre de structures/appels à projets qui réunissent des partenaires académiques et industriels : PEPR, DIM ... ceci démontre le besoin de cette approche très bas TRL pour effectuer la transition énergétique !

# CARMEN



# Evolution

Claire-Marie Pradier (suite):

- Pour avancer en sciences des matériaux, il faut une véritable révolution : sans doute quitter le classique et oser, innover, inventer, pour trouver de nouvelles propriétés, et se passer des éléments critiques, en combinant tout ça avec des nouvelles approches de caractérisations (coupler les techniques, haut débit, plateformes mutualisées, et IA !!!)
- Approches multi-échelles
- On n'a pas beaucoup entendu parler de formation (sauf 1 ou 2 intervenants) ; et pourtant, il faut !
- Il y a un futur magnifique pour CARMEN qui a déjà construit un consortium académique-EPICs et profiter des meilleurs moyens de caractérisation, et des experts, là où ils sont !

CARMEN



Evolution

***Merci Nathalie!***