

# 19

---

## ÉLABORATION, CARACTÉRISATION ET MODÉLISATION DU SOLIDE

Jean ÉTOURNEAU

*Président*

Gianguido Baldinozzi

Marie-Geneviève Barthes-Labrousse

Claude Bernard

Jean-Claude Boivin

François Charpentier

Marc Drillon

Jean-Marie Dubois

Gérard Ferey

Christian Guizard

René le Gall

Roland Madar

Guy Matzen

Léa Minel

Alain Peigney

Abel Rousset

Clément Sanchez

Jean-Michel Savariault

Philippe Thomas

Alain Wattiaux

Par essence la section 19 est concernée par la Chimie des Matériaux, elle est donc au cœur des recherches et des préoccupations concernant les grands secteurs de l'économie notamment les Sciences de la Vie, l'Environnement, l'Énergie, les Moyens de Transport et les Moyens d'Information et de Communication.

La Chimie du Solide et des Matériaux, la Métallurgie et la Thermodynamique sont des disciplines frontières qui, pour se développer sans perdre leur âme sont naturellement conduites à s'ouvrir vers la physique des solides, la mécanique, l'électronique et l'optique, l'électrochimie, la chimie organique et celle des polymères et plus récemment vers la biologie et les Sciences de la Vie. La section 19, qui est déjà très pluridisciplinaire ne pourra s'épanouir pleinement qu'en introduisant de plus en plus de transdisciplinarité, ce dernier point fera appel à une réflexion sur les problèmes de formation concernant les chercheurs, les ITA, mais aussi les doctorants sans lesquels nos Laboratoires et Instituts perdraient une partie de leur raison d'être.

## 1 – LA PROSPECTIVE

La Prospective est un acte nécessaire qui demeure toujours difficile. Malheureusement la prospective perd toute sa signification si elle est conduite comme par le passé dans la précipitation.

Mener une action de prospective conduit à faire l'état de l'art dans des domaines ciblés, à détecter les verrous scientifiques et technologiques, à sentir les grandes tendances et à proposer des orientations stratégiques. C'est donc être à l'écoute des autres communautés scientifiques et être sensible à la demande sociale.

Devraient être institués des groupes de réflexions permanents, réunissant scientifiques et industriels. Ces groupes, à géométrie variable, se réuniraient une ou deux fois l'an selon les besoins exprimés par la conjoncture et auraient pour missions :

- d'être un observatoire permanent pour faire l'état de l'art et pour donner des grandes orientations dans un ou plusieurs champs disciplinaires complémentaires ;

- de réfléchir sur le devenir des disciplines, en termes d'éducation, de formation des acteurs (académiques et industriels) et en termes de moyens matériels (regroupement d'équipements mi-lourds, politique en matière de grands instruments nationaux et internationaux, etc.) ;

- d'établir annuellement deux documents de synthèse, l'un pour les scientifiques sur le terrain, l'autre pour les décideurs.

Cette initiative pourrait s'inspirer des cahiers de synthèse élaborés il y a quelques années dans le domaine des matériaux. Ceci demanderait un effort important au départ et deviendrait à terme un simple problème de mise à jour.

*Remarque : Il sera utile de situer certaines missions des groupes de réflexions par rapport à celles des clubs CRIN et de l'Observatoire Français des Techniques Avancées.*

Les groupes de réflexion proposés seraient le lien idéal pour proposer des actions pluridisciplinaires et transdisciplinaires intra et inter-départements au CNRS et impliquant les autres organismes de recherche (Universités, CEA, INSERM, etc.).

La pluridisciplinarité et mieux la transdisciplinarité devraient conduire à des actions transversales sur projets (type Programmes Interdisciplinaires de Recherche) et la mise en place de Réseaux avec un noyau dur constitué par un nombre très limité de Laboratoires et d'Instituts. Le réseau peut répondre à plusieurs objectifs :

Il peut servir à favoriser les collaborations sur un objectif commun (GDR) ou simplement à permettre un échange de connaissances entre personnes d'une même communauté. C'est une démarche à encourager, en particulier vers certaines catégories de personnel qui n'ont pas l'habitude d'utiliser ce type de structure. Le réseau est un moyen de sortir certains ITA d'un isolement relatif (sur le plan de leur activité professionnelle) au sein de leur laboratoire : il peut leur permettre des échanges entre spécialistes du même domaine (mécaniciens, informaticiens, souffleurs de verre, etc.), une progression des connaissances, etc. Un tel type de réseau peut se mettre en place au niveau local, régional voire national, suivant le degré de spécialisation et donc l'importance de la communauté concernée.

Le réseau peut également répondre à un autre objectif : la mise en commun de moyens lourds dont ne peut disposer chaque laboratoire. L'évolution des équipements, aussi bien pour l'élaboration que pour la caractérisation, correspond à une augmentation importante des performances et de la sophistication, et donc du coût. De plus en plus, il faut s'associer et planifier un ensemble d'équipements complémentaires au sein d'une communauté donnée (exemple : opération RMN Grand Bassin Parisien).

Le réseau et tout regroupement de laboratoires sont aussi une solution pour atteindre une taille critique et présenter ainsi une visibilité que n'a pas un laboratoire isolé. La

structure correspondante peut se prévaloir d'une représentativité importante et devenir un interlocuteur privilégié pour les instances concernées : CNRS, Université, Ministère, Région, Europe, etc. C'est souvent une possibilité d'obtenir des moyens complémentaires.

Par ailleurs le CNRS devrait se servir de ses Unités Propres comme un outil pour mettre en œuvre une politique ambitieuse conduisant à la prise de risques. L'investissement de moyens importants (matériels et humains) dans ces Unités serait assorti d'une très grande exigence quant à leur utilisation.

## 2 – LA VALORISATION DES RECHERCHES

Le propos ici n'est pas d'opposer recherche fondamentale pure et recherche fondamentale utile à court terme pour développer des recherches appliquées. L'une et l'autre doivent s'enrichir mutuellement.

Les acteurs de la recherche publique et de l'industrie doivent travailler en partenaires et non dans un esprit de sous-traitance.

S'il faut en effet éloigner l'idée d'un pilotage intégral des institutions de recherche par « l'aval », il est néanmoins indispensable que le secteur productif soit irrigué par la recherche avec l'aide des organismes publics de recherche tels que le CNRS et l'Université par exemple, qui ont un rôle important à jouer tant sur le plan de l'avancement des connaissances que sur celui de la formation des hommes.

Les acteurs de la recherche publique doivent faire la recherche fondamentale que demande l'industrie, c'est le prix à payer pour que notre industrie de haute technologie soit compétitive sur le plan international. Il est évident que tout doit être mis en œuvre pour que les chercheurs du secteur public aient suffisamment

d'espaces de liberté pour continuer à créer des connaissances désincarnées de toute préoccupations industrielles. Ceci pose le problème des petites unités qui ne peuvent faire à la fois une recherche purement fondamentale et une recherche fondamentale liée aux applications. Ces deux aspects sont facilement conciliables dans les grandes unités et peut-être dans le cadre de fédérations de laboratoires à condition que celles-ci aient une véritable politique scientifique.

Il sera donc nécessaire de faire la distinction entre valoriser des connaissances et contribuer à résoudre des problèmes scientifiques et techniques auxquels se trouve confrontée l'industrie pour développer un produit, un procédé ou une technologie.

Dans le premier cas, il faudra convaincre que tel ou tel produit ou procédé par exemple pourra être développé avec un bon compromis entre performances et prix de revient si le marché est naturellement de grande diffusion : le coût pourrait ne plus être un facteur bloquant dans des secteurs de prestige. Ici se pose le problème de la création d'entreprises par les chercheurs. Un chercheur par essence n'est pas un entrepreneur et réciproquement. Cependant, c'est l'association d'un chercheur et d'un entrepreneur qui sera de toute évidence la clef du succès. On ne peut faire deux métiers à la fois : chercheur la nuit et chef d'entreprise le jour. C'est une recommandation forte que nous devons faire aux chercheurs qui auraient le goût d'entreprendre.

Dans le second cas, la mission des laboratoires académiques sera d'aider les industriels dans la résolution de leurs problèmes, en mettant à leur disposition un vivier de connaissances de base. Faudra-t-il encore que pour ce faire, le chercheur soit à l'écoute des préoccupations industrielles. Cette approche nécessitera qu'un dialogue s'instaure entre l'ingénieur et le chercheur pour extraire des problèmes techniques leur composante scientifique. C'est à travers une telle analyse que le chercheur détectera les thèmes de recherche fondamentale qui devront être approfondis ou développés.

Cette approche rencontre néanmoins des difficultés avec les PMI-PME qui, suivant les interlocuteurs, n'ont pas ou ont oublié les connaissances scientifiques pour qu'un dialogue fructueux puisse s'instaurer. Il est absolument nécessaire que dans ce cas les chercheurs puissent traduire leurs compétences dans un langage adapté. La Délégation aux Entreprises du CNRS a déjà pris une initiative en sélectionnant un certain nombre de laboratoires pilotes pour favoriser le dialogue entre le monde des chercheurs et celui de l'Industrie, notamment avec les PMI-PME : l'idée étant de traduire dans un langage approprié le savoir-faire des laboratoires avec celui des chercheurs.

Pour les recherches qui ne sont pas pilotées par l'aval, demeure le choix des thèmes dans les Laboratoires et Instituts. Comment choisir et encourager un thème pour un Directeur ? Quelles sont les urgences de la demande sociale ? Une partie de la réponse à ces deux questions peut se trouver dans la constitution de groupes permanents de réflexion (*Voir* § 1)

Les laboratoires mixtes CNRS – Université – Industrie sont des lieux privilégiés pour développer une recherche fondamentale directement utilisable à moyen ou long terme. Cependant se pose toujours le problème d'une politique scientifique sur le long terme des industries impliquées dans les unités mixtes. Que deviennent les chercheurs si le laboratoire mixte est appelé à disparaître ? Cette question soulève le plan de carrière des chercheurs à travers la prise en compte de leur activité. Une évaluation des chercheurs des unités mixtes doit faire appel à des critères différents de ceux utilisés pour les chercheurs dont les activités sont essentiellement académiques.

### 3 – L'ÉVALUATION

L'évaluation concerne les chercheurs, les ITA et les Unités.

### 3.1 LES CHERCHEURS

Les unités propres et mixtes comportent des chercheurs du CNRS et de l'Enseignement Supérieur. Seuls les chercheurs du CNRS sont évalués par le Comité National alors que ce dernier est une instance d'évaluation pour la recherche publique dans son ensemble. Il devrait y avoir une certaine équité entre les deux communautés de chercheurs. Quelle procédure faudrait-il proposer ? Ne sont évalués dans l'Enseignement Supérieur, que ceux qui sont demandeurs de promotions. Au CNRS tous les chercheurs sont évalués.

Le Directeur de Laboratoire a une responsabilité importante. Il est à même de comparer les chercheurs des deux communautés en utilisant les critères classiques (publications, conférences, rayonnement international, prise de responsabilités qu'elles soient contractuelles avec l'industrie ou administratives, etc.). Cette anomalie en fait n'est qu'apparente, elle peut et elle doit se corriger au moment de l'évaluation des unités surtout lorsque celle-ci est faite par équipe.

L'évaluation est plus difficile pour les chercheurs proches de l'industrie et aujourd'hui pour ceux qui sont associés à une création d'entreprise.

Pour les chercheurs liés à l'industrie, nous devons faire appel à des critères moins académiques. Bien sûr la prise de brevets est un critère objectif, mais c'est une donnée un peu trop réductrice dans la mesure où beaucoup de recherches extrêmement utiles ne conduisent pas à la prise de brevet. C'est à l'industriel de témoigner par un rapport écrit de la qualité du chercheur. Selon les cas, les industriels pourraient être invités à venir en commission lorsque les procédures de la fonction publique les y autorisent. Il serait du devoir des rapporteurs de prendre contact avec les industriels concernés.

Pour les chercheurs créateurs d'entreprises, ce sont d'autres critères qui sont à mettre en avant, comme par exemple, leur succès au concours national des jeunes créateurs d'entreprises. Très souvent la création d'une entreprise dans le domaine des matériaux est

liée à la prise de brevets, ce qui est un critère très objectif pour l'évaluation du chercheur concerné. Le nombre de chercheurs créateurs d'entreprises reste toutefois extrêmement limité et les commissions sont à même de faire une évaluation objective et d'autant mieux que la Direction Générale du CNRS réserve quelques promotions pour ce type de chercheurs.

De plus en plus la tendance est de consulter le « citation index » pour les chercheurs. Les chercheurs qui sortent « du fond continu » sont vraisemblablement de très bons scientifiques mais attention le système qui établit le nombre de citations est peu compréhensible et souvent pervers. Beaucoup de chercheurs brillants et reconnus ne figurent pas au tableau d'honneur.

### 3.2 LES ITA

Dans le domaine de l'évaluation des ITA, tout est à inventer. L'évaluation ne se fait qu'à travers les concours. Ils sont encore trop peu nombreux et les critères d'évaluation des jurys ne sont pas homogènes d'un concours à l'autre.

Là encore, les Directeurs de laboratoires et les chefs d'équipe ont un rôle primordial à jouer. Mieux reconnaître le travail des ITA par des discussions approfondies lors des entretiens annuels et les encourager à suivre des formations. Mieux les intégrer à la vie du laboratoire en mettant en avant leur travail lors de manifestations scientifiques (affiches de réalisation techniques), remerciements dans les publications, etc.

### 3.3 LES UNITÉS

Le système d'évaluation des unités mis en place depuis quelques années semble satisfaisant. Plus de temps est consacré à la discussion avec les chercheurs et les ITA. Il faut garder le principe de l'évaluation par équipe. Ce n'est plus l'arbre qui cache la forêt.

Le rapport d'audit doit être en adéquation avec celui du rapporteur en commission. Il est donc indispensable que le rapporteur de section soit membre du comité d'audit.

La Science est de toute évidence la justification de l'existence d'une unité. Quelles que soient les disciplines, les missions d'une unité sont :

- de créer et faire progresser des connaissances en inscrivant son action dans le courant de l'évolution des Sciences ;

- de structurer au plan national et international des grands projets scientifiques ;

- de mettre à la disposition de la communauté scientifique française les outils de recherche les plus performants ;

- de faire preuve d'une réelle flexibilité dans la définition des objectifs de recherche sans pour autant suivre les modes ;

- d'être une pépinière de chercheurs et d'animateurs d'équipes pour répondre aux besoins de la communauté scientifique et de l'industrie ;

- d'être en prise directe avec les problèmes économiques d'une société qui, interpellant la science en permanence, en attend des réponses et, d'une certaine manière, la met en question.

Un comité d'audit doit intégrer dans sa démarche d'évaluation les missions précédemment décrites. Cependant ces missions ne peuvent être accomplies sans mettre en place une stratégie et une organisation. Le comité d'audit doit prendre en compte les aspects organisationnel et stratégique mis en œuvre :

- approche pluridisciplinaire voire transdisciplinaire et intégrée de la recherche ;

- partenariat international et industriel ;

- intégration dans la vie universitaire (formation de cadres pour la recherche, l'enseignement et l'industrie).

Les équipes d'une unité doivent avoir une très grande autonomie, condition obligatoire pour favoriser la créativité et le développement d'idées originales. Autonomie n'est pas synonyme d'indépendance. Tout doit être mis en

œuvre pour que les groupes de recherche ne constituent pas des bastions mais évoluent dans un cadre aussi harmonieux que possible en mettant à leur disposition les moyens humains et matériels indispensables pour développer des projets communs et faire émerger concrètement de jeunes talents. Éviter que les services collectifs soient sous le contrôle des équipes afin d'être réellement au service de tous.

## 4 – LE DEVENIR DES DISCIPLINES ET LES GRANDES TENDANCES

La section 19 regroupera très schématiquement quatre grandes disciplines :

- la Chimie du Solide ;
- la Science des Matériaux ;
- la Métallurgie ;
- la Thermodynamique.

Récemment était associée la **Radiochimie**, discipline tournée plutôt vers les problèmes d'analyse.

Les quatre disciplines citées sont très complémentaires, mais leur développement dans le temps ne s'est pas réalisé de manière harmonieuse. Par exemple, la Métallurgie et la Thermodynamique, disciplines nettement plus anciennes que la Chimie du Solide, sont menacées dans leur devenir (cadres vieillissants et tendances à ce que certains enseignements disparaissent). Toujours très orientée vers les métaux et leurs alliages, la Métallurgie a un impact économique beaucoup plus important que la Chimie du Solide, discipline récente puisqu'elle a vu le jour dans les années 60 tant en France qu'en Europe. Cette constatation sur la situation de la Métallurgie et de la Thermodynamique, peut se faire également dans d'autres pays (États-Unis, Canada). Faut-il conclure que la messe est dite et que les

apports fructueux du passé ont résolu tous les problèmes rencontrés tant sur le plan scientifique qu'industriel et que les verrous technologiques où ces disciplines avaient un mot à dire, sont débloqués ? On peut facilement démontrer que la réponse est non. Le tort de disciplines comme la Métallurgie et la Thermodynamique est peut-être d'exister depuis trop longtemps et donc d'apparaître un peu désuètes à l'esprit avide de nouveautés. Cette constatation pourrait se faire dans quelques années pour la Chimie du Solide si on n'y prend garde.

Pour redonner de la vigueur à l'ensemble des disciplines de la section 19, il est nécessaire de croiser les compétences. Ne trouve-t-on pas maintenant l'utilisation de concepts de la métallurgie traditionnelle dans les laboratoires de Chimie du Solide et de Science des Matériaux (problèmes d'interfaces, de joints de grains, de cristallisation, etc.) et réciproquement les raisonnements basés sur la liaison chimique chers aux chimistes du solide ne pénètrent-ils pas la métallurgie (chimie et réactivité de surfaces et des interfaces, calculs de structures électroniques, etc.) ?

Un dénominateur commun à toutes ces disciplines sont les méthodes de caractérisation élémentaires de surface et de volume et celles plus sophistiquées conduisant aux déterminations structurales et à l'analyse des défauts par exemple.

Le devenir des disciplines comme la Chimie du Solide, la Science des Matériaux, la Métallurgie et la Thermodynamique passera obligatoirement par le maintien de compétences au sein des unités comme par exemple la cristallographie et la cristallographie pour la Chimie du Solide, la thermodynamique et l'établissement de diagrammes de phases pour l'ensemble des disciplines de la section 19. Le maintien de ces compétences doit avoir un prolongement dans les enseignements de l'Université et des Écoles d'Ingénieurs, donc nécessité de faire des recrutements de Maîtres de Conférences appropriés.

Le devenir des disciplines de la section 19 passe aussi par une plus grande ouverture vers les autres champs disciplinaires. Cette ouverture

s'opère bien avec la Physique du Solide et les Sciences Physiques pour l'Ingénieur dès lors que le chimiste s'intéresse aux propriétés des matériaux qu'il prépare.

Depuis quelques années les chimistes du solide et une partie des métallurgistes recherchent des ouvertures vers la chimie organique et de celle des polymères pour l'élaboration (matériaux microporeux, etc.) et la mise en œuvre de nouvelles méthodes de synthèse à basse température par la voie de précurseurs organo-minéraux.

On peut constater par ailleurs que deux disciplines comme la Chimie du Solide et la Catalyse hétérogène se côtoient depuis de nombreuses années sans pour autant vraiment collaborer. Elles pourraient s'enrichir mutuellement par une volonté plus affirmée de collaborer à travers des projets communs. Les barrières ne sont qu'apparemment culturelles et la mise en commun de doctorants pourrait largement faciliter le dialogue et confronter les approches.

Plus récemment les chimistes, qu'ils soient « solidistes » ou « métallurgistes », ont compris qu'ils avaient beaucoup à apprendre de la nature dans des domaines que l'on peut identifier sans être exhaustif comme :

- matériaux à structure complexe ou hiérarchique ;
- matériaux structuraux et fonctionnels bio-inspirés ;
- bio-inspiration et élaboration industrielle de matériaux ;
- matériaux stimulables ;
- revêtements de surface fonctionnels ;
- biopolymères et biomatériaux de type implant ou prothèse ;
- catalyseurs et capteurs à empreintes sélectives conçus grâce à la reconnaissance moléculaire et à la chimie supramoléculaire.

C'est dans ce contexte que se développe au carrefour de la chimie, de la physique, de la biologie et de la médecine, ce champ nouveau d'investigation qui va constituer dans

l'avenir un secteur important de la Science des Matériaux. Le document de synthèse présenté en 2001 par l'Observatoire Français des Techniques Avancées sur Biomimétisme et Matériaux constitue une excellente base de réflexion pour constituer des réseaux de recherche.

L'un des enjeux de ce siècle sera l'étude des systèmes complexes s'inspirant du vivant et pour ce qui concerne les disciplines de la section 19, leur rôle sera de mettre au service de la communauté scientifique leur approche et leurs compétences pour la réalisation de systèmes hybrides organo-minéraux par exemple.

Un autre enjeu de ce siècle sera le développement des nanotechnologies à travers les nanobjets et les nanomatériaux. Les nanotechnologies qui en sont encore à leur début, nous donnent les outils pour jouer avec l'ultime jeu de construction de la nature – les atomes et les molécules. Tout est constitué de ces éléments et les possibilités de créer de nouvelles choses paraissent illimitées. On peut voir deux approches dans les nanotechnologies : se servir des molécules et des atomes comme briques, pour construire des systèmes complexes comme sait le faire la nature ou utiliser la matière à l'échelle nanométrique pour trouver de nouvelles propriétés ; ici on retrouve les nanomatériaux, objets dispersés dans une matrice ou objets nanostructuraux.

Il n'est pas question dans ce rapport de donner les orientations par secteur d'activité pour lesquelles la section 19 est concernée (*l'énergie, l'environnement, la santé et les sciences de la vie, les moyens de transport et les moyens d'informations et de communications*) – ceci devrait être le rôle des groupes de réflexion proposés pour faire une véritable prospective scientifique – mais plutôt d'exprimer les grandes tendances sur les recherches dans le domaine des matériaux : conception, synthèse, mise en forme, caractérisation, propriétés et modélisation.

En ce qui concerne la recherche de matériaux nouveaux à propriétés spécifiques, les efforts devraient porter sur les prédictions et leur conception à l'aide d'outils théoriques *ab initio* et d'outils expérimentaux s'inspirant de la chimie combinatoire par exemple.

Une synthèse rationnelle et raisonnée s'impose en chimie du solide et la démarche passera de toute évidence par une meilleure connaissance des étapes intermédiaires dans les processus mis en jeu au cours des réactions chimiques. La chimie du solide a pris du retard sur la chimie moléculaire.

La mise en forme s'oriente vers des objets de plus en plus petits (poudres nanométriques, matériaux nanostructurés). Un autre aspect de la mise en forme concerne aussi l'élaboration d'objets de formes complexes sans usinage. À la mise en forme des céramiques par exemple est aussi lié le contrôle des microstructures et des nanostructures dont dépendent les propriétés et les performances de l'objet final.

Les caractérisations doivent se développer vers le bas de l'échelle, c'est-à-dire vers des dimensions nanométriques et atomiques.

La détermination des propriétés doivent s'orienter vers des objets pour lesquels la surface et les interfaces prennent le pas sur le volume.

D'autres challenges concernent les problèmes de changement d'échelles tant pour la mise en œuvre des procédés que pour l'établissement de modèles pour passer de manière continue de l'échelle macroscopique à l'échelle atomique. Si beaucoup de phénomènes sont compris tant en chimie du solide qu'en métallurgie de l'échelle macroscopique et à l'échelle microscopique, beaucoup reste à faire pour la compréhension aux échelles plus petites.

Enfin les chercheurs devraient se préoccuper davantage du comportement des matériaux en service, de leur vieillissement et naturellement de leur recyclage qui résulte principalement de problèmes environnementaux et d'économie d'énergie.