

MATIÈRE CONDENSÉE : ORGANISATION ET DYNAMIQUE

Président de la section

Philippe GOUDEAU

Membres de la section

David BABONNEAU

Lydéric BOCQUET

Serge BOUFFARD

Florent CALVAYRAC

Marc de BOISSIEU

Michel DROUET

François GALLET

Alessio GUARINO

Pascale LAUNOIS

Jacques LE BRUSQ

Pierre LEVITZ

Nadine MEHL

Roland PELLENQ

Geoffroy PREVOT

Anne RENAULT

Christian RICOLLEAU

Hermann SELLIER

Martine SOYER

Odile STEPHAN

Damien VANDEMBROUCQ

Il est dit que l'écriture du rapport de conjoncture fait partie des prérogatives du comité national. La section s'est néanmoins interrogée sur l'impact de ce rapport de conjoncture sur les prises de décision des tutelles. Ce travail, qui ne faisait pas partie de nos tâches prioritaires, est le reflet de nos doutes. Il est écrit dans l'urgence à plusieurs mains sur la base de ce qu'avaient fait nos vaillants prédécesseurs.

La section 05 est l'une des sections les plus interdisciplinaires des 40 sections que compte le comité national. Traditionnellement ouverte vers la chimie (section 19 puis 15 pour la chimie des matériaux et section 11 pour la matière molle) et la mécanique (section 9), elle a évolué très rapidement vers les sciences de la terre et les sciences du vivant. Longtemps centré sur la détermination des structures cristallines et sur l'étude des liens structure-propriétés, le domaine couvert par la section 05 s'est considérablement diversifié. La matière condensée est étudiée dans tous ses états (cristaux, verres, liquides, etc.), sous toutes ses formes (matériaux massifs et leurs surfaces, milieux divisés – poreux, granulaires – et inhomogènes, nano-objets et hétéro structures, etc.), à différentes échelles spatiales et temporelles (nano-, méso- et macro-, de la picoseconde à des temps longs) et en toutes conditions (température et pression extrêmes, sous irradiation, sous sollicitations mécaniques, électriques, magnétiques, etc.).

Nous avons découpé ce rapport en trois sections, les deux premières étant relatives aux principaux sujets de recherche abordés par la communauté, ceux traditionnellement ancrés au cœur de la section 05 et ceux interdisciplinaires plus récents et la troisième étant consacrée à l'évolution des méthodes et techniques d'études. Cette introduction se terminera par des considérations générales relatives au fonctionnement de la recherche en France au travers du financement, de l'évaluation et de la parité.

MATIERE CONDENSEE AUX PETITES ECHELLES

Cette première section débute par quelques remarques sur l'évolution des objets étudiés et ses conséquences sur les méthodes nécessaires à leur analyse. En particulier, l'évolution depuis une dizaine d'années vers l'étude de systèmes de très faibles dimensions a été spectaculaire et sera durable. D'un point de vue structural, la cristallographie est indispensable, à la fois à l'identification des nouvelles phases aux faibles dimensions et à l'étude des petites et moyennes molécules organiques et jusqu'aux macromolécules. Le développement toujours croissant des études sous conditions extrêmes et des mesures résolues en temps – qu'autorisent les nouvelles sources de rayonnement – enrichit beaucoup notre connaissance des diagrammes

de phase et des cinétiques des transitions.

L'apparition aux échelles de longueurs nanométriques de nouveaux effets physiques et de nouvelles propriétés contribuent largement à l'intérêt pour les nanomatériaux. Nous distinguerons :

- les nano-objets isolés
- les surfaces nano-structurées
- la science des matériaux

MATIERE CONDENSEE DITE MAL ORGANISEE

Cette rubrique concerne les matériaux désordonnés (verres, granulaires), la matière dite « molle » (gels, systèmes colloïdaux, cristaux liquides) et les systèmes biologiques, qui présentent des diagrammes de phases, des dynamiques, des propriétés mécaniques et de transport très complexes. Elle met en valeur l'ouverture des thématiques de la section 05 vers la matière dite moins organisée vers laquelle sont allés des chercheurs et des unités issus de la matière condensée.

LES OUTILS DE LA RECHERCHE

Les progrès de la physique de la matière condensée résultent d'allers-retours permanents entre expériences, modélisation théorique et, de plus en plus, simulations numériques. Nous insistons sur l'importance de l'instrumentation avant de faire un point sur les développements récents et sur l'apport des méthodes numériques.

LES MOYENS DE LA RECHERCHE

Les changements importants apparus dès 2005 dans le financement de la recherche ont des répercussions non négligeables sur l'organisation de la recherche et les laboratoires.

En particulier si l'ANR a effectivement permis de développer de nouveaux projets on peut s'interroger sur : (i) les conséquences sur l'organisation des laboratoires en interne puisque le financement d'équipe est privilégié. Il semble important qu'une partie du 'préciput' revienne aux laboratoires ; (ii) Le manque de souplesse, le suivi pointilleux et le manque d'autonomie mis en place par l'ANR qui a copié les moins bonnes pratiques qui existent au niveau Européen. S'inspirer des conseils mis en avant par l'ERC (financement sur 5 ans, évaluation à posteriori, flexibilité dans le management des fonds requis) serait certainement une très bonne idée.

Force est de constater de manière générale une augmentation des financements sur contrats (ANR, financements CNano, RTRA, régions, etc.) au détriment des crédits récurrents. Nos moyens sont croissants certes, mais via des appels d'offre. Nous sommes devenus pour la plupart d'entre nous des chercheurs ... de contrats ! Nous consacrons une partie non négligeable de notre temps à définir des programmes de recherche à court terme (3 ans). Cette démarche est incompatible avec des activités de recherche scientifique de fond qui s'étalent généralement sur le long terme.

Les programmes permettent de plus en plus le financement

de stages postdoctoraux. Il y a là un « plus » en termes de nombres de têtes et bras évident à court terme mais surtout un revers : (a) de plus en plus de précaires – les post-docs- et donc un métier moins attractif pour les jeunes (et moins accessible aussi pour les femmes), et (b) obligation aussi ici pour le chercheur permanent de définir des objectifs à court terme.

L'EVALUATION DE LA RECHERCHE

La mise en place en 2008 de l'AERES, agence d'évaluation des laboratoires, formations et organismes, a des répercussions néfastes sur le bon fonctionnement du comité national. En particulier ses prérogatives en matière d'évaluation des laboratoires pour leur association ou non au CNRS ont de facto fortement diminué. La section 05 estime que l'évaluation des chercheurs doit se faire dans le contexte de leur laboratoire. En conséquence, l'évaluation des laboratoires et l'évaluation des chercheurs sont indissociables.

LA PARITE

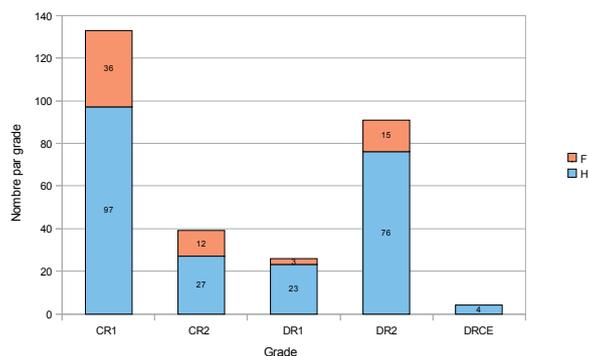
Concernant la répartition des femmes et des hommes dans la section 05, on constate des disparités très nettes au passage DR2 (27 % de femmes CR1 – 16,5 % DR2) qui s'accroissent hélas encore aux niveaux DR1 (11%) et DRCE (0 %). Les graphes ci-après permettent de mieux apprécier ces déséquilibres. Il y a visiblement une auto censure au concours DR2 puisque seulement 19 % des femmes CR1 postulent (concours 2010). Pour les concours CR, on constate que le rapport hommes/femmes des candidatures est sensiblement le même que celui des recrutements (autour de 20% en 2010). C'est loin d'être le cas pour toutes les sections et en particulier au sein de l'INP CNRS.

La composition des jurys de recrutement ou des instances d'évaluation est très certainement un élément à prendre en compte si l'on souhaite agir pour la parité.

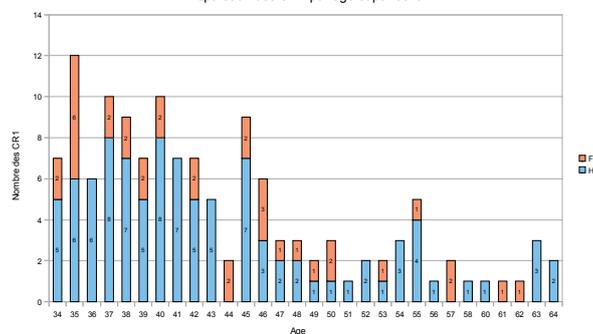
1 – MATIÈRE CONDENSÉE AUX PETITES ÉCHELLES

1.1 STRUCTURE, EXCITATIONS ÉLÉMENTAIRES CRISTALLOGRAPHIE, DETERMINATION DE STRUCTURES

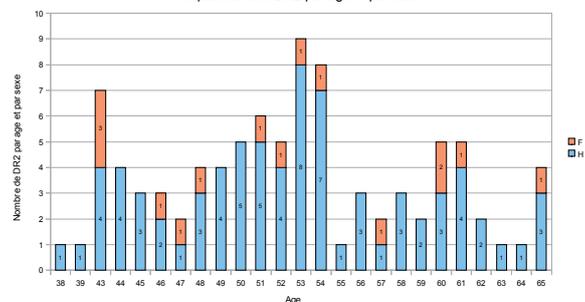
Répartition des grades par sexe



Répartition des CR1 par âge et par sexe



Répartition des DR2 par âge et par sexe



La cristallographie conventionnelle des macromolécules biologiques n'est plus un sujet de recherche pour les physiciens, les méthodes de détermination des structures à résolution moyenne étant bien établies et maîtrisées par les biologistes. Il est aujourd'hui possible d'obtenir, avec les synchrotrons de troisième génération, des données à résolution ultra haute (0,5 à 0,8 Å) qui doivent donner accès à la densité électronique précise et aux propriétés électrostatiques. Néanmoins, des progrès restent à accomplir pour extraire ces informations de nature électronique des données de diffraction (réduction des données, cartographie de densités électroniques, modélisation validation des modèles issus de calculs théoriques, type Density Functional Theory - DFT d'ordre n). On peut noter ici que l'arrivée des synchrotrons de troisième génération a joué un rôle essentiel dans la détermination de structures biologiques. En quelques années, le nombre de structures biologiques déterminées par diffraction X a largement dépassé celui déterminé par RMN.

Un autre problème toujours difficile concerne les résolutions de structures à partir de données de diffraction très pauvres. Les progrès récents de la cryomicroscopie devraient apporter une solution alternative à la résolution de ce problème.

La mise en service des lasers à électrons libre qui délivreront un faisceau de rayons X durs (10 à 20 keV) cohérent, s'annonce comme une petite révolution dans le domaine de la résolution de structure. Plusieurs applications sont envisagées (voir chapitre grands instruments) mais une des applications 'phare' concernera la résolution de la structure de macromolécules ou protéines uniques. La cohérence permet de résoudre le problème de la phase et la brillance très importante permet de faire diffracter une protéine unique sans avoir besoin de la cristalliser. Une activité intense se développe en Europe, au Japon et aux USA autour de cette thématique à l'interface physique-biologie. Un investissement plus important est souhaitable en France dans ce domaine.

L'autre application de cette technique dans le domaine de la matière condensée concerne la détermination de la forme et du champ de déformation de nano-objets. Il s'agit là d'une technique très prometteuse dans laquelle quelques équipes françaises sont déjà bien investies.

La cristallographie a également énormément progressé dans le domaine de la détermination de la structure des 'cristaux aperiodiques' qui englobe les phases modulées incommensurables, les phases composites incommensurables et les quasi cristaux. Les exemples de cristaux aperiodiques sont de plus en plus nombreux (minéraux, éléments simples sous pression, supraconducteurs haute température, ondes de densité de charge, alliages intermétalliques, thermoélectriques,

molécules organiques, protéines) et comprendre leur structure de manière détaillée et l'implication de l'apériodicité sur les propriétés physiques reste une question d'actualité dans beaucoup de domaines. Il est important de perpétuer et disséminer le savoir faire acquis en France dans ce domaine qui est à l'interface de l'INP et de INC du CNRS. Une bonne articulation entre la partie détermination de structure et les connaissances en 'cristallochimie' est indispensable dans ce domaine.

Au delà de la détermination de la structure 'moyenne' à l'aide de la mesure de l'intensité intégrée des pics de Bragg, la mesure de la diffusion diffuse, un domaine qui avait fait le renom de l'école française de cristallographie avec pour tête de file André Guinier, a retrouvé un gain d'intérêt au cours des dernières années du fait de l'apparition des détecteurs bidimensionnels numériques performants. Rappelons l'importance du désordre sur les propriétés physiques d'autre part. Avoir une compréhension fine de l'écart au réseau idéal, du désordre, est en effet essentiel dans la plupart des domaines de la matière condensée et particulièrement en science des matériaux.

De manière plus générale, une approche combinant expérience et calcul de l'énergie par modélisation à l'échelle atomique (soit par des calculs DFT ou en utilisant des Hamiltoniens phénoménologiques adaptés du type potentiels Embedded Atom Model - EAM ou autres) commence à émerger. Il y a encore peu d'exemples aboutis mais les calculs d'énergie et de la stabilité relative des structures peuvent permettre de discriminer entre des solutions conduisant à un accord similaire au niveau de l'expérience.

Les conducteurs quasi-unidimensionnels continuent de poser des problèmes subtils, dont la résolution progresse bien, grâce à l'emploi conjugué des techniques de diffusion/diffraction X et de sondes locales comme la microscopie par effet tunnel (STM) qui est capable de détecter directement une onde de densité de charge (ODC) en surface, par exemple. L'influence de défauts ou de désordre sur les propriétés reste un sujet d'actualité. Si de nombreuses études se sont attachées à comprendre l'influence de défauts ponctuels sur le comportement d'une ODC, de nouvelles orientations concernent par exemple la dynamique de ces ODC sous courant voit le jour.

STRUCTURES ET PROPRIETES VIBRATIONNELLES

La communauté française bénéficie de la présence de spécialistes des études de la matière sous très hautes pressions. Ce domaine d'intérêt est très vaste puisque de nombreuses propriétés sont susceptibles d'être modifiées par les fortes pressions. Pour les propriétés structurales et vibrationnelles, il s'agit d'étudier :

i) l'évolution des liaisons interatomiques ou moléculaires et les transitions de phase dans différents types de composés
ii) la stabilité de la liaison chimique sous pression afin de comprendre les réactions explosives par exemple. L'intérêt des hautes pressions pour les géologues est particulièrement à souligner puisqu'on sait réaliser en laboratoire des conditions approchant celles qui règnent dans le manteau inférieur de la Terre. On peut ainsi déterminer les structures et les domaines de stabilité

(pression et température) des principaux minéraux terrestres et mesurer le tenseur des constantes élastiques qui régissent la propagation des ondes acoustiques et son anisotropie dans les géo matériaux.

Les hautes pressions sont connues pour modifier considérablement les propriétés phoniques, magnétiques et électroniques en changeant les distances interatomiques, c'est-à-dire le recouvrement des orbitales externes et la densité électronique au niveau de Fermi. Dans le domaine du magnétisme, on peut ainsi modifier la température d'ordre, la nature de l'ordre magnétique, la valeur des moments et des susceptibilités magnétiques des composés non magnétiques. A noter une évolution récente vers des expériences étendues aux hautes températures, en particulier sous l'effet de chauffage flash par laser.

Un autre point concerne l'effet des hautes pressions sur la transition vitreuse, la dynamique des verres et leurs propriétés (viscosité, etc.) ainsi que sur le processus d'amorphisation.

L'étude des liquides sous conditions extrêmes est moins avancée que celle des solides. Un champ important est à explorer : propriétés structurales et dynamiques, en relation avec la fusion ; transitions fluide-fluide, transitions cristal-amorphe ou amorphe-amorphe. D'autres projets sont plus particulièrement orientés vers la compréhension du noyau des planètes (études des alliages de fer liquide avec des éléments légers).

A signaler le besoin d'études sous conditions extrêmes des matériaux nanométriques ou nanostructurés pour mieux connaître l'influence de la pression sur les effets de taille réduite.

Les études en conditions extrêmes nécessitent un fort couplage avec les centres de rayonnement synchrotron. Les sources de neutrons sont aussi de plus en plus utilisées, grâce à la réalisation de nouvelles presses opérant sur de plus gros volumes de matière.

PHONONS ET DYNAMIQUE DE RESEAU

La dynamique de réseau est une thématique qui a vu un regain d'intérêt lors des dernières années grâce à l'émergence de nouvelles techniques expérimentales (diffraction inélastique des rayons X par exemple, jouvence de l'ILL), à la nécessité d'une meilleure compréhension de propriétés telles que la conductivité thermiques dans certains matériaux par exemple (thermoélectriques, amorphes) et à la possibilité d'effectuer des simulations sur des systèmes dont la taille permet d'aborder des systèmes réalistes. Cette thématique est particulièrement développée pour les systèmes simples sous pression, les systèmes 'complexes' (fullerènes, thermoélectriques, amorphes, ondes de densité de charge, quasi cristaux, ...) et les supraconducteurs où le couplage électron-phonon joue un rôle majeur. La possibilité d'effectuer des calculs et simulations de plus en plus réalistes permet maintenant de mener de front expérimentation et simulations. Un des verrous à lever dans ce domaine restera pour les années qui viennent réside dans l'interprétation théorique des simulations et expériences.

TRANSFORMATIONS DE LA MATIÈRE CONDENSÉE – CRISTALLOGRAPHIE RESOLUE EN TEMPS

Suivre les transformations de la matière, in situ, en temps réel, a toujours été un objectif essentiel mais souvent hors de portée. Les problématiques associées sont très variées : diffusion dans les solides, réactions chimiques à l'état solide, transitions de phase, nucléation et croissance de cristaux, etc.

Encore exceptionnelles, des mesures de diffraction complètes, avec une résolution temporelle de 100 ps sont maintenant obtenues, en particulier à l'ESRF, permettant de suivre des structures métastables photo-induites. Cette nouvelle activité qui relève maintenant pleinement de la section 05 sera aussi développée sur SOLEIL et devrait connaître un grand développement dans les années à venir. De grands espoirs se focalisent aussi sur le FEL allemand qui devrait permettre de descendre à des temps de l'ordre de la femto seconde et de suivre la dynamique de transition électronique.

De façon plus générale, le suivi en continu d'un diagramme de diffraction pendant une réaction fait souvent apparaître des phases intermédiaires et la compréhension détaillée des mécanismes de formation des matériaux serait précieuse pour optimiser leurs propriétés. Une des questions de fond posées par ces observations ultra-rapides est de savoir si un chemin de réaction peut toujours être déduit de données certes résolues en temps avec la précision nécessaire mais ne procurant à chaque instant qu'une vision globale moyennée des systèmes.

1.2 NANOPHYSIQUE

Le développement des nanotechnologies repose sur la maîtrise structurale de nano objets, de l'échelle atomique jusqu'à leur assemblage en dispositifs, typiquement à des échelles supérieures au micromètre. Il faut savoir faire croître des nano-objets (approche du bas vers le haut « bottom-up ») ou nano structurer (approche du haut vers le bas) réguliers qu'il est d'usage de classer suivant le nombre de dimensions nanométriques qu'ils possèdent, points, lignes, couches ultra-minces.

NANOSTRUCTURES

Les recherches menées sur les nano-objets aussi bien au niveau de leur croissance par des techniques variées que de leurs propriétés structurales et physiques continuent de croître de manière spectaculaire. La nanophysique autour de ces objets prend toute son ampleur à cause de nouveaux effets qui apparaissent, qui n'existent pas dans les matériaux massifs équivalents, dès qu'au moins une de leurs dimensions devient du même ordre de grandeur qu'une caractéristique physique du matériau : libre parcours moyen des électrons, rayon de Bohr de l'exciton dans les semi-conducteurs, longueur de corrélation magnétique...

Les domaines concernés sont très variés allant de l'optique au magnétisme en passant par la catalyse et les propriétés mécaniques des solides, et les nano-objets étudiés vont

des nanoparticules auto-organisées ou non, déposés sur des surfaces cristallines ou non ou bien enrobés dans des matrices, des nano-tubes ou nano-fils jusqu'aux interfaces et hétérostructures rencontrées dans les matériaux nanostructurés : composites, couches minces et multicouches de semi-conducteurs, de métaux, d'oxydes ou hybrides, bi-cristaux...

Nanoparticules bi-métalliques

On assiste depuis quelques années, aussi bien au niveau national qu'international, à un fort développement dans le domaine des nanoparticules bi-métalliques. Le fait d'associer deux métaux au sein d'une particule de taille nanométrique, d'où le terme de nanoalliages, permet d'étendre considérablement les potentialités de ces systèmes grâce à une diversité structurale couplée aux effets d'ordre chimique et de ségrégation superficielle. Par comparaison avec les alliages métalliques en volume, le rapport élevé du nombre d'atomes de surface par rapport à celui de cœur conduit à une grande diversité de structures atomiques et chimiques faisant apparaître des phases nouvelles par rapport au diagramme de phase volumique, ce qui élargit encore davantage le spectre des applications potentielles : magnétisme, optique, catalyse... Ainsi l'étude de diagrammes de phases de nanoalliages, où la taille du système apparaît comme une troisième variable, représente actuellement un enjeu crucial dans le domaine des nanosciences où il est nécessaire de rassembler les compétences expérimentales et théoriques au niveau national.

Les recherches menées sur ce thème visent à comprendre les mécanismes mis en jeu lors de la croissance des nanoparticules bi-métalliques, d'étudier leurs propriétés structurales, physiques (magnétiques) et chimiques (catalytiques) en fonction de leur taille, de leur structure et de leur composition chimique. Pour cela, des développements importants sont nécessaires au niveau de l'élaboration des nanoparticules dans le but d'obtenir des nano-objets dont on contrôle la taille, la structure et la composition chimique. D'un point de vue encore plus fondamental, les modifications des comportements thermodynamiques de ces systèmes de dimension réduite par comparaison avec les comportements observés dans les matériaux massifs (effet de taille sur les diagrammes de phases) sont au cœur de cette thématique.

En France, il existe une large communauté de physiciens et de chimistes autour de la thématique des nanoparticules bi-métalliques, qui est très active tant au niveau des modes d'élaboration et des techniques de caractérisation que dans l'étude de leurs propriétés optiques, magnétiques et catalytiques. Plusieurs équipes de recherche sont aussi spécialisées dans la modélisation de leurs propriétés structurales, physiques et chimiques. Ainsi, un GDR a été créé en 2008 sur cette thématique.

NANOSTRUCTURES CARBONÉES : DES NANOTUBES DE CARBONE AU GRAPHÈNE

Les dernières décades ont vu naître et s'épanouir les recherches sur les fullerènes (découverts en 1985), puis celles sur les nanotubes de carbone (mis en évidence en 1991) et enfin sur le graphène (depuis 2004), sans oublier les nano-diamants : les nanostructures carbonées,

aux extraordinaires propriétés électroniques, optiques, mécaniques, etc, sont l'objet de nombreuses études fondamentales ou à visée industrielle. Il n'est pas possible de détailler ici la liste exhaustive des recherches menées autour de ces nano-objets par les chercheurs de la section 05. Citons simplement deux domaines d'études importants autour de :

- la structure et l'organisation des nano-carbones. Les échantillons sont multi-phasés et leur étude structurale est donc délicate. Les chercheurs doivent, pour parvenir à des conclusions sans ambiguïté, associer expériences et modélisation et croiser un ensemble de méthodes complémentaires, multi-échelles : microscopie électronique à haute résolution, microscopie tunnel, diffraction électronique, spectroscopie EELS, microscopie électronique à balayage, photoluminescence, spectroscopie Raman, diffusion des rayons X et des neutrons. Ces études, complexes, sont la pierre de base des études des propriétés physiques, chimiques ou des effets biologiques de ces nano-objets.

- la croissance des nanotubes de carbone. Après 19 ans de recherches intensives menées partout dans le monde, les mécanismes de croissance des nanotubes de carbone sont encore mal compris et la croissance d'une seule sorte de nanotube, de diamètre et d'hélicité fixés, est toujours un rêve. Depuis quelques années, des analyses in-situ, pendant la croissance, sont développées (dans un microscope électronique, sur un spectromètre Raman ou sur synchrotron) qui devraient conduire à des avancées importantes dans les années à venir ...

Enfin, le graphène (un plan de graphite) a pu être isolé en 2004 et on sait aussi maintenant à le faire croître. Les électrons dans ce nouveau système peuvent être décrits comme ayant une masse nulle et nombre de propriétés originales en découlent. Ces dernières années ont vu le développement de exponentiel des études théoriques et expérimentales dans le domaine.

Les premières réalisations expérimentales de ce système ont non seulement révélé les très bonnes propriétés de transport de ce nouveau matériau, mais aussi des effets quantiques reliés à la structure électronique particulière de ce dernier, comme par exemple un effet Hall quantique anormal. Aujourd'hui différentes techniques (graphène exfolié, croissance sur SiC) permettent d'obtenir du graphène de bonne qualité. Les études des propriétés de ces films et de leur utilisation comme support à la croissance de nanoplots, qui intéressent la section 5, commencent donc à se développer.

DES SURFACES AUX NANOSTRUCTURES

A coté des méthodes usuelles de nano structuration par lithographie post-dépôt, les approches dites bottom-up combinent les maîtrises des techniques de croissance et des effets de contraintes. La fonctionnalisation des substrats permet, de plus, d'accéder à des auto organisations régulières. Parmi les plus récents développements, on peut noter l'élaboration de nanofils semi-conducteurs par la voie vapeur-liquide-solide.

SURFACES DANS LE MILIEU AMBIANT

L'espace 2D est exploré depuis des décennies par la physique des surfaces et interfaces qui est un objet d'études fondamentales par les propriétés spécifiques qu'il induit la rupture de périodicité par rapport aux matériaux volumiques : réarrangements atomiques (relaxations, reconstructions) ou chimiques (ségrégations superficielles, réactivité), transitions de phase (pré-fusion, désordre ou ordre induit par la surface, mouillage). De nombreuses questions fondamentales restent posées, que ce soit sur des systèmes a priori simples (dynamique de surface, marches) ou plus complexes (surfaces de quasi-cristaux, alliages de surfaces, surfaces d'oxydes, interfaces entre matériaux de nature différente).

Environnement

L'étude des surfaces et nanostructures n'est plus confinée aux systèmes sous vide et ultra-vide. Le développement des techniques expérimentales permet des études sous gaz, en condition de fonctionnement (in operando), en milieu liquide. Ces études se font principalement par le développement de micro-cellules de réactivité, de méthodes de pompage différentiel, et de techniques pouvant opérer sous gaz ou en milieu liquide, comme les méthodes de caractérisation optique (rayons X, UV-visible, IR).

Propriétés et techniques expérimentales spécifiques des surfaces

Les observations à l'échelle nanométrique des surfaces ont depuis longtemps dépassé le cadre de la mesure de la topographie. Les propriétés électroniques et magnétiques sont couramment observées. Les développements portent sur les mesures à l'échelle nanométrique des propriétés thermiques et élastiques des surfaces, sur l'amélioration de la résolution des propriétés chimiques et structurales, sur l'augmentation de la sensibilité pour des mesures de forces, et sur des études de propriétés spécifiques, comme par exemple des modes de plasmons de surface. Parmi les nouvelles techniques apparues récemment et développées en France, on peut citer le Grazing Incidence Fast Atom Diffraction, qui est en quelque sorte l'équivalent du RHEED avec des atomes ; le Ballistic Electron Emission Microscopy qui permet entre autres d'observer le magnétisme de couches minces à l'échelle du nm.

AUTO-ORGANISATION

Traditionnellement, l'élaboration de nanostructures passe par des dépôts de films minces et leur structuration latérale par lithographie. Ces techniques continuent de progresser mais approchent de leurs limites. De nombreux travaux sont en cours pour trouver des méthodes d'élaboration alternatives fondées sur l'auto-organisation « naturelle » (par exemple, à partir des reconstructions) ou « artificielle » (par exemple, par

pré-adsorption). Le cas des reconstructions de surface est particulièrement illustratif de ce passage de l'étude d'un phénomène (caractérisation et compréhension de la reconstruction) à son utilisation (nano structuration par la contrainte). Ainsi, la reconstruction en chevrons de Au (111) permet d'utiliser cette surface comme gabarit (modulable par des marches) pour auto-organiser des agrégats magnétiques (Co, etc.). Dans la continuité des études de l'auto-organisation de nanostructures, une nouvelle étape apparaît : la nano structuration des propriétés. Il ne s'agit pas seulement de comprendre et d'étudier l'origine de l'auto-organisation des systèmes, mais de contrôler les propriétés qui découlent de l'auto-organisation. Citons les effets de couplage dipolaire de nano plots magnétiques, l'influence des corrélations spatiales des boîtes quantiques dans les modes dits « de galerie » de nano disques à base de semi-conducteurs, les modifications des propriétés élastiques et plastiques induites par la mise en ordre d'inclusions de tailles nanométriques au sein d'un film mince. Cette nouvelle étape a un effet structurant sur la communauté scientifique et incite les chercheurs de différentes disciplines à collaborer.

AGREGATS STRUCTURES

Une voie prometteuse, bien que lourde à mettre en œuvre, est l'élaboration des matériaux originaux par assemblage d'agrégats. On peut obtenir des couches minces nanostructurées qui gardent une mémoire de la structure et des propriétés des agrégats libres, intermédiaires entre celles des amorphes et celles des cristaux. Des matériaux covalents nouveaux ont ainsi été préparés à partir des phases cages existant à l'état gazeux. Un autre défi est la mise en réseau 2D d'agrégats supportés.

PHASES NOUVELLES EN FILMS MINCES

Des travaux innovants sont impulsés par les progrès des microscopies en champ proche et des techniques de diffraction sur les alliages de surface (interface) et les films minces, seuls ou en multicouches. Le jeu entre thermodynamique et cinétique et la variété des effets de support permettent d'obtenir nombre de structures et/ou de compositions qui n'existent pas dans les phases volumiques. Un renouveau des problématiques vient aussi de ce que les matériaux étudiés changent. A côté des interfaces entre métaux, semi-conducteurs et oxydes, un domaine en pleine évolution est celui de l'interaction entre surfaces et molécules organiques ou systèmes biologiques.

1.3 SCIENCES DES MATERIAUX

Ce domaine que l'on regroupait jadis sous le terme métallurgie, présente à la base une forte interdisciplinarité avec l'INC (chimie) et l'INSIS (mécanique). L'étude des matériaux 'réels' demeure un véritable défi. On passe de l'étude de systèmes modèles à des systèmes réels où plusieurs échelles entrent en jeu : atomique,

défauts, taille du grain,, etc.... Les études in-situ et in-operando offrent la possibilité d'étudier de manière fine l'influence de cette structuration multi-échelle sur les propriétés physiques pour un matériau en cours d'usage. Des progrès notables ont été obtenus dans le domaine de la plasticité grâce aux simulations numériques

– à l'échelle atomique, où des simulations en dynamique moléculaire apportent un point de vue très nouveau sur des phénomènes comme l'épinglage des dislocations par des défauts d'irradiation ou encore le durcissement de solutions solides. Les structures de cœur des dislocations sont également beaucoup mieux connues, ainsi que des mécanismes élémentaires comme le glissement dévié, d'une importance considérable pour l'organisation des dislocations en arrangements tridimensionnels responsables de l'écroutissage. Des études récentes concernent les processus de nucléation des dislocations à partir de défauts de surface ;

– à l'échelle mésoscopique, où l'on sait maintenant suivre les arrangements qui dépendent de la géométrie de glissement et des interactions élastiques à grande distance. Des prédictions du durcissement latent (modification de la contrainte d'écoulement due à l'interaction avec d'autres systèmes de glissement) deviennent possibles.

Il reste à améliorer la prise en compte simultanée de défauts de dimensionnalités différentes (défauts ponctuels/dislocations ; dislocations/interfaces) et à coupler les simulations mésoscopiques à l'échelle supérieure (éléments finis).

Au plan expérimental, des observations in situ par microscopie électronique en transmission (MET) ont montré comment les dislocations se déplacent sous contraintes dans les quasicristaux et des matériaux à microstructures complexes. La méthode des phases géométriques a été utilisée en MET pour mesurer les champs de contrainte de précipités nanométriques ce qui a permis de relier les propriétés mécaniques à la microstructure réelle du matériau. A noter aussi les études très fines de lignes de glissement, rendues possibles par le couplage d'un microscope à force atomique sur une machine de traction. La plasticité des films ultra-minces et des matériaux nanostructurés est un domaine actif qui a bénéficié de l'apport de techniques de diffraction de rayons X in situ et de simulation en dynamique moléculaire. La nanoindentation est maintenant très utilisée : elle permet de sonder les propriétés mécaniques aux échelles nanométriques et aussi dans des zones exemptes de défauts. C'est ainsi une technique de choix pour étudier la nucléation des dislocations.

Dans les matériaux qu'ils soient nanostructurés ou massifs, des progrès restent à faire pour comprendre les mécanismes de nucléation des défauts étendus : l'enjeu va de la compréhension des mécanismes de déformation des nanomatériaux à celui de la transition fragile ductile des matériaux massifs. On peut également qualifier de nanomatériaux certains matériaux massifs. Il peut ainsi s'agir d'un système polyphasé, organisé à une échelle proche du nanomètre par transformation d'une phase mère. Se pose alors le problème des transformations de phase mises en jeu pour engendrer cette nanostructure. L'élaboration de nano-composites à très haute résistance mécanique par déformation plastique intense (tréfilage, torsion-compression, etc.) est un cas particulier qui offre

de séduisantes perspectives, par exemple pour la fabrication de conducteurs pour la production de champs magnétiques pulsés. Ces alliages forcés (« driven alloys ») posent de nombreux problèmes relatifs à leur stabilité thermodynamique et aux transformations de phases imprévues qui peuvent se produire dans le champ de contrainte interne. Ils présentent de plus des microstructures complexes couvrant différentes échelles qui leur confèrent leurs propriétés remarquables.

La compréhension des propriétés mécaniques des matériaux aux petites échelles reste un enjeu scientifique fondamental majeur. Le problème a été posé dès les années 1950 mais le formidable développement des techniques de fabrication et d'analyse des nano-objets offre aujourd'hui des perspectives nouvelles pour aborder ces problèmes. La communauté française s'est structurée en 2008 au sein du GDR Mécano pour répondre de manière efficace aux questions posées par les effets de taille. De nombreux résultats remarquables ont été obtenus et permettent ainsi de placer la France à une bonne place dans la compétition internationale.

2 – MATIERE CONDENSEE DITE MAL ORGANISEE

La section 05 a depuis plusieurs mandatures ouvert ses thématiques vers la matière dite moins organisée vers laquelle sont allés des chercheurs et des unités issues de la matière condensée. Il faut, pour sonder cette matière, la soumettre à des sollicitations diverses, en mesurer les effets, en dégager des interprétations. Ceci exige une instrumentation toujours plus performante et une modélisation accrue qui toutes deux conduisent à des développements aux interfaces. Les matériaux désordonnés (verres, granulaires), la matière dite « molle » (gels, systèmes colloïdaux, cristaux liquides) et les systèmes biologiques, présentent des diagrammes de phase, des dynamiques, des propriétés mécaniques et de transport très complexes qui intéressent la communauté de la section 05 ; ils font l'objet d'une activité théorique importante visant à unifier la compréhension de systèmes aux échelles très différentes (par exemple rhéologie des verres colloïdaux et plasticité des verres métalliques). Cela a conduit ainsi à développer des concepts souvent nouveaux de physique statistique hors-équilibre à l'interface entre plusieurs domaines. Ce sont des domaines très présents aux interfaces avec la chimie, la mécanique, la biologie, et la géologie. En particulier, avec ces deux derniers domaines, les interactions sont de plus en plus fortes mélangeant les communautés de chercheurs ce qui n'est pas sans poser des problèmes d'affectation et d'évaluation. Avant de revenir plus longuement sur l'interface physique-biologie, nous mentionnons plusieurs exemples de domaines où nous retrouvons la section 05 dans ses interfaces :

Les milieux granulaires, prépondérants dans les milieux naturels, ont des potentialités importantes au niveau des applications industrielles et de gestion des risques (écoulements, avalanches, érosion). Les développements récents se portent notamment vers l'étude de la morphodynamique des systèmes d'intérêt géologique et du transport sédimentaire.

Les questions d'élasticité, de plasticité et de fracture des milieux hétérogènes font l'objet de nombreux travaux expérimentaux et théoriques, avec désormais une approche multi-échelles visant à faire le lien entre échelles microscopiques et comportement macroscopique. Cela a conduit depuis quelques années à des développements importants vers la rhéologie des fluides complexes (fluides à seuil, thixotropes, systèmes pâteux, mousses, émulsions, ...), motivés notamment par les analogies mises en avant depuis une dizaine d'année avec les questions fondamentales de transition vitreuse, « jamming » et brisure d'ergodicité. Ces questions revêtent cependant une importance très concrète dans de multiples applications du côté industriel et il y a un besoin fort pour développer une compréhension unifiée du comportement mécanique de ces systèmes.

La microfluidique, qui a connu un essor considérable au cours des dernières années, est un domaine par essence trans-disciplinaire. La microfluidique s'est imposée à la fois comme un outil indispensable dans de multiples domaines aux interfaces (physico-chimie, mécanique des fluides complexes, physique des systèmes biologiques, bio-ingénierie, ...); mais également comme un domaine à part entière au cœur d'études fondamentales mettant en jeu de nouveaux phénomènes physiques. La microfluidique s'étend désormais vers les échelles encore plus petites avec le développement fortement croissant de la nano-fluidique. Ce développement, intimement lié à la maîtrise toujours plus importante des outils de nano-fabrication, ouvre de multiples perspectives vers l'exploration de nouveaux phénomènes et fonctionnalités (nano-filtration, conversion d'énergie, transport de molécules biologiques, ...).

Les hautes pressions, utilisées pour mieux comprendre les interactions qui fixent la cohésion des solides, intéressent de façon évidente les physiciens de la section 05 mais aussi la physique du globe.

Dans le domaine des nanosciences, le développement de nouveaux objets et techniques nanométriques apporte des outils innovants pour la biologie et la médecine (manipulation de nano objet unique, microscopie en champ proche, nano détecteurs de bio molécules, nanoparticules magnétiques pour l'IRM, ...). Ces utilisations récentes ouvrent de nombreuses perspectives notamment pour le milieu médical.

INTERFACE AVEC LA BIOLOGIE

L'interface physique biologie s'est fortement développée en France depuis 20 ans. La physique y a joué un rôle moteur car de nombreux physiciens issus de la communauté des propriétés structurales et dynamiques de la matière condensée et de la matière molle sont allés vers cette interface. Ils y apportent leurs connaissances des structures complexes et des assemblages multi-échelles, leurs outils conceptuels (mécanique, physique non linéaires, physique statistique hors-équilibre), et leur savoir-faire en matière d'instrumentation innovante et d'imagerie. Cette interface se retrouve en section à tous les niveaux d'organisation du vivant.

L'étude et la manipulation de molécules individuelles ont rendu possible l'observation en temps réel du fonctionnement biologique (enzymes, moteurs moléculaires). Les techniques d'imagerie (« champ proche », nanoparticules,

marqueurs fluorescents) permettent le suivi individuel d'une molécule au cours de son cheminement dans la cellule ou sur la membrane, la visualisation d'un réseau en action dans la cellule ou encore la visualisation des interactions enzyme-ADN.

De nouvelles méthodes d'imagerie optique, acoustique ou Imagerie par Résonance Magnétique - IRM (microscopie non-linéaire, optique à haute résolution, imagerie à ondes évanescentes, tomographie cohérente et incohérente...) offrent de nouvelles perspectives, tant en biologie que pour des applications médicales. Le développement de nouvelles approches comme la diffusion X résolue en temps est également en plein essor pour l'étude de la structure ou de la réactivité de molécules biologiques.

A un niveau de complexité supérieur, la biologie cellulaire bénéficie de multiples approches relevant de la physique et de la chimie, qui permettent d'appréhender des processus complexes comme la fusion membranaire, l'adhésion, la migration, la polarité et la différenciation cellulaire.

La reconstitution et l'auto assemblage de systèmes biomimétiques, domaine où s'exprime largement notre communauté, ouvre aujourd'hui de nombreuses voies d'application. Les systèmes multicellulaires, dont la dynamique de fonctionnement met en jeu de nombreux réseaux de signalisation et de régulation, peuvent aujourd'hui être abordés par une approche physique (populations neuronales, développement embryonnaire, morphogenèse et régénération des tissus).

La mécanique et l'hydrodynamique physiques, associées à l'utilisation de structures micro fabriquées (motifs, réseaux, canaux micro fluidiques) permettent de modéliser le comportement mécano sensible des cellules, ou la croissance des tissus, en fonction de paramètres extérieurs (rigidité, écoulements, gradients de nutriments...), avec des retombées importantes dans le domaine de l'oncologie ou de l'environnement..).

De même, la compréhension des mécanismes élémentaires de la perception (visuelle, acoustique ou tactile) est un domaine où les outils et les modèles de la physique permettent actuellement des avancées spectaculaires.

La biologie des systèmes concerne une faible partie de la communauté de l'interface physique-biologie de la section 05 mais y est tout de même présente. Les réseaux biologiques (réseaux génétiques, ou de protéines) sont omniprésents dans la matière vivante et orchestrent le fonctionnement de la cellule, ses cycles et son horloge mais aussi ses réponses à des stimulations ou à des changements d'environnement. A une autre échelle, les réseaux d'interactions entre individus dans les colonies d'animaux génèrent des phénomènes d'auto-organisation et des comportements collectifs. L'enjeu qui émerge, en particulier pour la physique statistique et numérique, porte sur ces systèmes ayant une multiplicité de niveaux d'organisation biologique, et dont le comportement global dépend, souvent de façon non-linéaire, de l'architecture de ces réseaux. La physique apporte à ces études des méthodes d'investigation, notamment optiques, de plus en plus résolues spatialement et temporellement, mais aussi des concepts permettant de modéliser ces phénomènes dans leur globalité.

3 – LES OUTILS DE LA RECHERCHE

3.1 TECHNIQUES EXPERIMENTALES ET INSTRUMENTATION

En physique de la matière condensée, les expériences jouent un rôle essentiel. Si certaines sont encore légères et demandent plus d'imagination et d'habileté que de moyens financiers, beaucoup d'autres sont très sophistiquées et coûteuses. Parmi celles-ci, un grand nombre exige une infrastructure de Très Grands Equipements (TGE). Dans tous les cas, des personnels ingénieurs et techniciens qualifiés sont indispensables pour les mener à bien. Le secteur de la physique est globalement sous doté en personnel ITA ce qui est dommageable non seulement à notre discipline mais aux autres sciences aussi, étant donné le rôle prépondérant joué par les physiciens en matière d'instrumentation scientifique. Un renforcement des effectifs d'ingénieurs et techniciens est nécessaire dans de nombreux secteurs innovants.

La physique expérimentale de la matière condensée fait appel, principalement à trois grandes classes de méthodes ou de moyens d'étude: les moyens d'élaboration, les méthodes spectroscopiques (incluant la diffraction) et enfin les microscopies et autres techniques d'imagerie et de microanalyse. On constate que ces différentes classes de dispositifs doivent de plus en plus souvent être réunies sur un même appareillage pour donner des résultats probants. C'est une tendance lourde due en particulier à la part grandissante prise par l'étude des objets de dimension nanométriques dont la réactivité chimique impose une caractérisation complète in situ. Ceci se traduit alors soit par l'adaptation en laboratoire des moyens de caractérisation sur les bâtis d'élaboration, soit dans le cas des TGE par la réalisation de bâtis adaptables.

Par exemple, il est indéniable que les microscopies en champ proche ont révolutionné la science des surfaces et qu'il est à présent impensable d'aborder ce domaine sans disposer d'un STM ou d'un AFM. Se discute à présent la possibilité d'associer imageries chimique et structurale (XAFS) à l'échelle nanométrique par combinaison de microfaisceaux X et de microsondes locales (AFM ou SNOM). Pour étudier des interfaces enterrées et des systèmes multicouches, il est essentiel d'utiliser aussi d'autres techniques, par exemple la diffusion de rayons X en incidence rasante aux petits et aux grands angles (GISAXS et GIWAXS). Plus généralement, pour avoir une approche multi-échelle du volume jusqu'au niveau atomique, il faut coupler des techniques de diffraction des neutrons, des rayons X ou des électrons avec l'imagerie par microscopie électronique.

La création de centrales technologiques et plateformes expérimentales (ex IEMN de Lille, EMIR ou MET-SA), alimentant et d'une certaine manière infléchissant le travail des laboratoires, n'est pas contradictoire avec le développement par les laboratoires de nouveaux instruments conçus spécifiquement pour des expériences moins lourdes. Les chercheurs doivent être encouragés à préserver leur capacité à réaliser des montages originaux et à ne pas s'en remettre entièrement à des appareils achetés « clé en main ». Pour cela, il est indispensable de veiller à ce que le financement des plateformes et

réseaux ne se fasse pas au détriment des moyens expérimentaux des laboratoires et à maintenir des services (bureau d'étude, ateliers de mécanique, électronique, programmation, etc...). Plus généralement, il faut rappeler que les découvertes les plus remarquables sont souvent dues à l'apparition d'un nouvel instrument.

Il y a en France une Ecole d'instrumentation qui s'est illustrée au travers du développement de la radiocristallographie, de la microscopie électronique à balayage, de la sonde ionique, de la sonde atomique tomographique, des détecteurs de particules et des TGE. L'instrumentation est un élément important de l'interdisciplinarité que le CNRS entend développer. Il faut revitaliser l'instrumentation scientifique française par un meilleur soutien et une meilleure reconnaissance accordés à ceux qui se consacrent à cette activité à haut risque, avec de longues périodes non productives en termes de publications. Ceci passe entre autre par une revalorisation de la part du soutien de base des laboratoires par rapport au financement sur projets à court terme, de type ANR. Très succinctement, on peut souligner quelques évolutions en cours ou quelques projets pour chacune des grandes catégories d'instruments.

TGE, SOURCES DE NEUTRONS, RAYONNEMENT SYNCHROTRON

Ces Très Grands Equipements sont indispensables à un grand nombre de travaux sur la matière condensée. Le Laboratoire Léon Brillouin et l'Institut Laue Langevin restent des fournisseurs très efficaces de neutrons. L'ILL a vu se concrétiser son programme de jeunesse qui a abouti à des gains significatifs sur le flux et la détection, permettant d'étudier des échantillons plus petits par exemple. Le LLB est aussi un fournisseur de neutrons important, complémentaire de l'ILL. Il assure par ailleurs un rôle important et indispensable de formation des utilisateurs. Le développement continu des instruments autorise de plus en plus des études de la matière biologique jusqu'ici impossibles faute de quantité de matière suffisante. Les études en conditions extrêmes ont récemment bénéficié de la mise au point de « presses gros volumes ». On notera aussi celles s'appuyant sur des caractéristiques particulières des neutrons comme la variation de contraste isotopique ou à la diffusion inélastique. Le projet d'une 'European Spallation Source' (ESS) est maintenant en passe d'être budgétisé. Le projet sera développé à Lund (Suède) avec une mise en service à l'horizon 2020. Les premières équipes pour la conception sont mises en place. Il est important de maintenir une communauté Française active autour de cette technique. 2007 a été l'année des premiers photons fournis par le nouvel anneau français de lumière de 3ème génération, SOLEIL, construit en Ile-de-France. Après quelques retards, les premières lignes de lumières ont été ouvertes aux utilisateurs experts fin 2008. Au final, la communauté disposera de 24 lignes inscrites au budget initial. Le choix des lignes de lumière assure le caractère pluridisciplinaire de ce centre de recherche et garantit une interaction fructueuse entre les diverses communautés de chercheurs. Parmi les avantages de Soleil, citons :

- la résolution spectrale et la forte brillance pour la détection

de traces encore plus faibles et l'étude à très haute résolution des excitations électroniques et vibrationnelles de la matière ;

- la polarisation (linéaire et circulaire) de la lumière pour l'étude du magnétisme, de nano-structures en particulier ;
- la focalisation pour les systèmes de petite taille ou confinés en conditions extrêmes ;
- la cohérence pour la dynamique des systèmes désordonnés, les fluctuations, etc.

L'imagerie y sera développée dans toute la gamme des longueurs d'onde, depuis l'infra rouge jusqu'aux X durs. La bio-cristallographie y tiendra une large place, tout en s'insérant dans un programme plus large d'étude de la matière biologique, en solution, aux interfaces etc. Une part significative d'activités liées à des enjeux de société comme l'environnement ou la recherche médicale, ou à des objectifs industriels est attendue.

Les synchrotrons de 3ème génération ont permis le développement de nouvelles techniques d'analyse structurale : la diffraction X résonnante allie la sélectivité chimique et la sensibilité à l'ordre de l'EXAFS à la sélectivité de phase de la diffraction. La diffraction magnétique résonnante des rayons X donne accès à des modifications structurales qui sont indétectables sur les pics de diffraction non magnétiques. La diffusion aux petits angles sous incidence rasante renseigne sur la morphologie et l'organisation spatiale, à une échelle mésoscopique, entre des objets présents sur une surface hôte (films minces nanocomposites).

Quoique le plus souvent non locales ou à faible grandissement, les techniques X progressent vers une réelle imagerie microscopique: micro-tomographie 3D avec une résolution spatiale approchant le micron, cartographie d'orientations cristallines ou de niveaux de contrainte, radiographie en contraste de phase ou avec un contraste renforcé par des effets de diffraction entre le monochromateur et un second cristal analyseur placé derrière l'échantillon, méthode bien adaptée à l'observation des objets peu absorbants (matière biologique, etc.). A citer aussi, la microscopie de photo-émission (PEEM) avec des rayons X polarisés circulairement qui donne une image locale de l'aimantation, avec une sélectivité chimique qui permet d'analyser couche par couche une hétéro-structure.

La mise en service des lasers à électrons libre dans le domaine des rayons X durs (énergies de 8 à 20 keV), est une véritable révolution. En effet, le faisceau produit aura une cohérence transverse de l'ordre du mm et une brillance 10 ordres de grandeur supérieure à ce qui est obtenu dans les synchrotrons de troisième génération. De plus la structure temporelle sera également plusieurs ordres de grandeur inférieure à ce qui est disponible actuellement avec des impulsions de durée de l'ordre de 10 à 100 fs. Pour résumer la potentialité de ces faisceaux, il suffit de retenir qu'il y aura autant de photon dans une impulsion de 10 fs que pendant 1 sec sur une source synchrotron de troisième génération telle que l'ESRF, permettant donc de réaliser des expériences sur une seule impulsion.

Parmi les domaines d'application dans le champ de la section 05 on peut citer : l'imagerie par diffraction de molécule unique (biologie en particulier), mesures de phénomènes ultra-rapides entre 10 fs et quelques ps (couplage électron-

phonon, réaction photo-induites et transfert électroniques, état intermédiaires...), mesure de forme et champ de contraintes de nano-objets enterrés, dynamique 'lentes' (transitions ordre-désordre, phénomènes diffusifs, phasons dans les cristaux aperiodiques...) de la microseconde à la seconde, visualisation de propagation d'ondes de choc, propagations de phonon

Il y a actuellement trois projets dans le monde qui visent à produire des faisceaux Laser X dans le domaine de longueur d'onde autour de 0.1 nm en utilisant des sources 'électrons libres': Stanford (USA), Spring 8 (Japan) et Hambourg (X-FEL Européen). Stanford a produit le premier faisceau laser X dur en 2009 et les premières expériences démarrent en 2010, Spring 8 devrait démarrer en 2011 et Hambourg en 2014.

Il est incompréhensible que l'investissement financier de la France dans le laser Européen X-FEL de Hambourg reste aussi ridiculement faible qu'actuellement.

Enfin, il est à noter le programme ambitieux concernant l'Upgrade ERSF pour intégrer les nano faisceaux mais aussi l'effort particulier fait en France dans le domaine de la nano imagerie 3D basses énergies et ses applications à la biologie, la matière diluée et les systèmes colloïdaux. La reconstruction de l'objet étudié passe par un traitement d'image qui nécessite le développement d'algorithmes puissants tournant sur des clusters dans lesquels il est impératif de mettre de la physique.

ACCELERATEURS, IRRADIATIONS

L'irradiation est une sollicitation particulière des matériaux dont l'intensité peut être ajustée sur une large gamme en jouant sur les caractéristiques des projectiles utilisés. L'intérêt des irradiations est double : comprendre et prévoir les comportements des matériaux qui les subissent d'une part, et de l'autre, utiliser les irradiations pour modifier les matériaux et créer de nouvelles propriétés.

Sur le premier plan, les environnements radiatifs pour lesquels une activité sur les matériaux sous irradiation reste nécessaire sont liés aux problèmes de sécurité des installations nucléaires, de gestion des déchets radioactifs ou au domaine de l'espace où les effets du rayonnement cosmique sont activement étudiés pour les dommages qu'il pourrait occasionner.

La description des matériaux organiques sous irradiation fait intervenir une étape supplémentaire de chimie radicalaire, décrite en détail pour l'eau mais beaucoup moins bien dans les phases solides où des techniques de spectroscopies résolues en temps restent à mettre en œuvre. Le comportement de la matière biologique sous irradiation est décrit par une succession d'étapes (physiques, chimiques, biologiques) plus ou moins indépendantes. Même si cette approche se justifie par la séparation temporelle de ces étapes, une approche interdisciplinaire serait certainement profitable, notamment avec l'utilisation conjointe par les trois communautés des irradiations pulsées.

D'une façon générale, les irradiations en laboratoire fournissent une base de connaissances indispensable à la réalisation de simulations numériques seules à même de prévoir les conséquences des irradiations dans les conditions réelles (champ complexe, diverses contraintes couplées, temps d'exposition longs, etc.). Elles fournissent

aussi un moyen efficace de modifications contrôlées des couches de surfaces des matériaux. Dans ce domaine, l'implantation ionique en immersion plasma (PIII ou PBII), encore peu développée en France est une technique efficace pour le traitement d'échantillons de géométrie complexe ou le dopage des jonctions ultra minces.

Rappelons toutes les informations données par les faisceaux d'ions en matière d'analyse: ordre structural, composition, gradient de concentration, etc. Les mêmes accélérateurs possédant le plus souvent les deux fonctions d'irradiation et d'analyse. Ces analyses peuvent être menées sur des matériaux mais aussi au niveau de cellules ou tissus biologiques, elles sont par essence d'usage pluridisciplinaire. Il y a certainement une action à mener pour augmenter les collaborations entre la communauté des irradiations et les physiciens de la matière condensée.

MICROSCOPIE ELECTRONIQUE ET NANOSCIENCES

L'essor des nanosciences s'est accompagné du développement et/ou de l'amélioration de techniques de caractérisation permettant d'aller plus loin dans la connaissance ultime des nano-objets. Des techniques d'études spécifiques ont vu le jour : citons par exemple la microscopie en champ proche magnétique, la microscopie de photoélectron couplée au rayonnement synchrotron (PEEM) ...

Parallèlement à ces développements, le microscope électronique est devenu un instrument incontournable lorsqu'on étudie des nano-objets et tous les laboratoires dont les thématiques sont centrées sur les nanosciences possèdent un ou plusieurs microscopes. Aujourd'hui la microscopie électronique n'est plus un simple outil dédié à l'imagerie mais permet de déterminer et de comprendre les propriétés structurales, chimiques et électroniques de nano-objets et de nano-structures grâce à la diversité et à la complémentarité de différentes techniques présentes sur un seul instrument : imagerie et diffraction filtrées en énergie, spectroscopie de pertes d'énergie des électrons et analyse X dispersive en énergie avec une sonde nanométrique, tomographie, microscopie de Lorentz, holographie.... Elle permet de plus d'étudier une très large gamme de matériaux allant des nano-objets aux objets de taille micrométrique en passant par les bio-matériaux. Dans tous les cas, l'analyse structurale des objets étudiés et la compréhension des relations entre la structure et leurs propriétés locales ou macroscopiques demandent des informations sur la nature chimique et les états électroniques des éléments étudiés ainsi que l'arrangement structural de ces éléments. Dans de nombreux cas, ces informations doivent être déterminées à l'échelle de quelques nanomètres.

Depuis quelques années, la microscopie électronique quantitative connaît une véritable révolution technologique tant au niveau des sources d'électrons avec le développement de monochromateurs qu'au niveau des lentilles électromagnétiques avec le développement des correcteurs d'aberration sphérique. Ainsi, il est non seulement possible de résoudre des structures en imagerie directe grâce à une résolution ponctuelle inférieure à 0,1 nm mais également de quantifier, dans le cas des objets

de phase, l'intensité de l'image haute résolution puisque dans ce cas l'intensité d'un point est directement reliée au potentiel projeté du cristal dans le plan d'observation. L'intérêt d'une telle avancée technique ne se limite pas à la résolution ponctuelle en imagerie. En effet, les microscopes équipés de tel correcteur permettent également de s'affranchir des effets de délocalisation, extrêmement limitatifs pour l'étude structurale des interfaces et des joints de grains. L'absence de délocalisation permet d'envisager l'étude de surfaces de nano-objets en projection.

Dans le cas de la spectroscopie de perte d'énergie à haute résolution associée à la microscopie, les progrès proviennent surtout de l'apparition de nouvelles sources, monochromateur ou canon à cathode froide, et également de l'amélioration des spectromètres. Les performances actuelles tendent à rapprocher la spectroscopie EELS de la spectroscopie d'absorption X (XAS). La résolution spatiale de l'EELS combinée à une résolution en énergie attendue sur les nouveaux MET (0,1 eV), comparable à celle du XAS, laisse envisager un champ d'application considérable. La résolution spatiale (inférieure à 0,1 nm) est désormais accessible à la spectroscopie EELS grâce à la correction d'aberration de sphéricité du condenseur permettant la focalisation du faisceau d'électrons dans une sonde de 0.05 nm (ultime). Il devient désormais possible d'obtenir des informations spectroscopiques (valence, état de liaison) d'un atome, d'une impureté, d'un défaut ou bien encore relatives à une interface.

En lien avec la réduction de la taille des objets étudiés, de nouvelles difficultés surgissent au niveau de la manipulation, de l'orientation des objets (qui peuvent être très anisotropes et nécessiter plusieurs directions d'observation) et au niveau de la visualisation, de la détection et de l'analyse des signaux de très faibles intensités issus de ces objets aux dimensions réduites. Si on veut surmonter ces difficultés, il faut avoir accès à des méthodes adaptées pour la préparation des échantillons (Focused Ions Beam - FIB), bénéficier de microscopes dédiés ayant chacun les meilleurs performances possibles dans un domaine d'application donné (résolution spatiale, résolution en énergie, limitation du bruit de fond...) et développer des méthodologies, combinant expériences et modélisations, en ayant toujours comme objectif de déterminer des informations quantitatives sur les objets étudiés. Pour parvenir à ce but, un réseau national, METSA, assure pour la communauté scientifique française la plus large ouverture d'instruments de pointe ainsi que la mise à disposition des compétences de chercheurs spécialisés dans les toutes dernières techniques de microscopie électronique avancée et de sonde atomique à la communauté scientifique française.

MICROSCOPIES EN CHAMP PROCHE

L'apport considérable des microscopies en champ proche pour les nanosciences a déjà été largement évoqué. Ces techniques sont idéales pour obtenir des informations libres de tout effet de moyenne, permettant à la fois d'atteindre les propriétés intrinsèques des nanoparticules et de mieux comprendre les effets de couplage avec leur environnement. Suivant la nature du matériau, et de sa topographie, les propriétés physiques locales sont analysées par microscopie tunnel (STM), puis une étude spectroscopique, souvent à basse température,

permet d'examiner les propriétés électroniques traduisant le confinement quantique ou diélectrique de ces nanostructures. Pour le cas des matériaux magnétiques, aucune sonde locale du magnétisme n'existe à l'heure actuelle en solution de routine, mais il est certain que la microscopie tunnel utilisant des sources d'électrons polarisés en spin va se développer dans un avenir proche.

Il faut souligner aussi l'emploi des microscopes à champ proche pour l'élaboration de nano-objets, construits atome par atome ou molécule par molécule ou encore pour la fabrication et la manipulation de petits agrégats. Les microscopes en champ proche permettent également d'organiser artificiellement ces nano-structures sur un substrat non fonctionnalisé, tout comme ils peuvent être utilisés outils de gravure, de marquage ou de greffage, contribuant ainsi à la fonctionnalisation des substrats.

Les développements actuels de techniques comme le STM ou l'AFM concernent surtout les observations sous différents environnements. A titre d'exemple, le couplage d'un microscope à force atomique à une micromachine de traction ou encore l'observation des empreintes de nano-indentations ont ouvert un nouveau champ d'investigation sur les mécanismes de formation des défauts à la surface des solides contraints.

DIFFUSION INELASTIQUE ET QUASI ELASTIQUE DE LA LUMIERE

La spectroscopie Raman à basse fréquence renouvelle l'étude du vieillissement des matériaux polymères ou vitreux, en mettant en évidence des fluctuations de cohésion à l'échelle du nanomètre résultant de séquences de déplacements atomiques coopératifs. L'interférométrie Raman, mettant à profit la grande longueur de cohérence spatiale des phonons acoustiques, permet de sonder un grand nombre de diffuseurs et d'en déterminer, grâce aux effets d'interférence, la répartition spatiale. On peut ainsi mettre en évidence la localisation spatiale d'états électroniques 2D par le désordre. On peut également mesurer le degré d'alignement de boîtes quantiques superposées, alignement – en principe – induit par les contraintes d'épitaxie.

SPECTROSCOPIE DE MOLECULES UNIQUES

Parmi les défis à relever, citons l'observation de molécules adsorbantes non fluorescentes. La microscopie de contraste interférentiel photo thermique pourrait l'autoriser. Elle est d'ores et déjà capable de détecter des particules d'or de quelques nm qui peuvent être couplées par voie chimique à des molécules organiques.

Autre défi, effectuer des observations « à température ambiante », ce qui est essentiel pour les systèmes biologiques (actuellement cryofixés en général). Une piste est l'application de cycles thermiques locaux, rapides, pour reconstituer la dynamique de protéines, par exemple, au moyen d'une série d'instantanés, pris à basse température, de la même molécule.

SOURCES LASERS PULSEES ET EXPERIENCES « POMPE-SONDE »

L'apparition de sources lasers pulsées et accordables donne lieu à un développement important des études de dynamique de la matière condensée, les durées d'impulsions, qui descendent jusqu'à quelques dizaines de femtosecondes, étant bien adaptées aux temps caractéristiques de nombreux phénomènes. Dans les expériences « pompe-sonde », une première impulsion, de puissance relativement forte, excite l'échantillon puis une seconde, dérivée de la première retardée, vient mesurer l'état de l'échantillon à un temps donné par le retard imposé. Les cristaux à effet non linéaire permettent de disposer de longueurs d'ondes différentes pour les deux impulsions.

Au niveau microscopique, la relaxation vers l'état d'équilibre de l'excitation induite par l'absorption de photon se fait par une cascade de processus qui dépendent, de façon cruciale, de la structure électronique du matériau considéré (métal, semiconducteur, isolant), ainsi que de sa taille et de son environnement. Au final, l'échantillon aura vu sa température monter, de quelques dizaines à quelques centaines de degrés. Il peut en résulter la disparition d'une phase ordonnée (par exemple, le ferromagnétisme), ce qui signifie que la dynamique de cet ordre est accessible par de telles expériences.

Le paramètre-clé de ces études est l'accordabilité en longueur d'onde, qui permet de créer une excitation spécifique, puis de sonder sélectivement l'état de l'échantillon, ce qui est indispensable pour séparer les différents processus de la cascade de relaxation de l'énergie.

Le développement de sources laser à impulsions courtes (fs) et d'énergie importante (J) permet de créer à la surface de l'échantillon un champ électrique extrêmement important. Entre autres types de particules, des rayons X sont émis en impulsions d'une centaine de femtosecondes. Ceci donne accès à une science X ultra-rapide d'un grand intérêt pour les études de dynamique structurale.

Un gain de plusieurs ordres de grandeurs tant en augmentation de la brillance qu'en diminution de la durée des pulses est attendu des futurs lasers à électrons libres. Une autre voie, beaucoup moins lourde, et également prometteuse pour approcher le domaine de la femtoseconde, est celle des tubes X utilisant les sources lasers pulsées accordables mentionnées ci-dessus, même si le plus faible flux en restreint l'application aux phénomènes reproductibles périodiquement.

ELABORATION DE FILMS MINCES ET AUTRES MATRICES DE NANO-OBJETS

Les outils d'élaboration des films minces et ultra-minces, souvent à la base des nano-structures, ont bien évolué. L'épitaxie par jets moléculaires permet par exemple une gradation très précise des compositions qui permet de mieux contrôler les niveaux de contrainte dans les hétéro structures, et d'améliorer la qualité cristalline, même si les dislocations restent encore un réel problème

dans nombre de systèmes.

Les techniques utilisant les faisceaux d'ions, au même titre que la chimie douce, font aujourd'hui partie de la panoplie alternative d'élaboration de matériaux nano structurés en films minces ou en îlots disséminés en surface ou à proximité.

3.2 SIMULATION NUMERIQUE ET THEORIE EN MATIERE CONDENSEE

Les activités théoriques en Matière Condensée sont souvent regroupées sous le sobriquet modeste de «modélisation» qui se veut mêler «théorie» et «simulation numérique», illustrant leur attachement à décrire (comprendre, représenter, ...) une réalité concrète par l'étude de systèmes réalistes en ce qu'ils sont proches des observations expérimentales, voire de conditions et des propriétés d'usage (applications). Il ne s'agit pas d'opposer activités théoriques et numériques, mais de rappeler que ces dernières sont une partie intégrante et un élément indispensable du triangle « expérience-simulation-théorie », tout en étant clairement différentes dans leur forme et dans leur esprit d'une pure activité théorique ; «expérimentation numérique» est souvent un terme approprié. Ces différents domaines ne doivent cependant pas se concevoir comme des activités séparées, mais comme un continuum ; de nombreux physiciens ont des activités mixtes impliquant au moins deux de ces trois aspects. La modélisation et l'expérimentation numérique peuvent être vues comme un moyen d'interaction directe avec l'expérience réelle, comme un laboratoire d'idées pour l'expérience comme pour la théorie. C'est un champ naturellement interdisciplinaire par le partage des outils communs avec les mathématiques appliquées, l'ingénierie, la chimie...

La modélisation en Matière Condensée se doit de rendre compte des diverses échelles mises en jeu : spatiales (du nm au m) ou de temps (de la picoseconde à l'heure ... voire plus). Ces diverses échelles interviennent simultanément par exemple du point de vue des diverses longueurs caractéristiques d'un phénomène d'auto-organisation, ou des divers temps caractéristiques de processus cinétiques de croissance et/ou de diffusion. Actuellement on peut distinguer (i) la modélisation explicite de la structure électronique (ii) les approches de physique statistique et chimie physique et (iii) les approches en direction des grandes échelles en lien avec les sciences pour l'ingénieur. Un défi actuel est de faire interagir ces différentes échelles, au sein des groupes de recherche comme au sein des programmes de calcul. Dans ce contexte la méthodologie moderne consiste à partir d'une description à l'échelle atomique des interactions (structure électronique), permettant ensuite d'identifier les mécanismes élémentaires mis en jeu (par dynamique moléculaire ou méthodes de Monte-Carlo d'équilibre) à des échelles inférieures au nanomètre et à la nanoseconde, puis d'en déduire des mécanismes effectifs (par exemple ceux de la diffusion) permettant de passer à des échelles supérieures (en distance et en temps) par l'utilisation de simulations de type Monte-Carlo cinétique par exemple. Dans les cas les plus appliqués, les événements identifiés et leur énergétique peuvent même venir nourrir les logiciels de simulations généralement basées sur une approche de

type « milieux continus » et qui reposent sur des modèles comportementaux. Deux exemples ce type de démarche est peut-être celui de la TCAD (Technology Computer Aided Design) en micro-électronique, ou la dynamique des dislocations (DD) dans le domaine de la plasticité des métaux.

Pour ce qui est de l'étape fondamentale que constituent la détermination de la structure électronique et le calcul de l'énergie d'un système de particules en interaction, l'arsenal des méthodes disponibles est vaste depuis les méthodes dites *ab initio* (i.e. ne faisant appel à aucune paramétrisation ; ce qui ne veut pas dire sans approximation !) jusqu'aux approches plus légères mais paramétrées regroupées sous le vocable « potentiels semi-empiriques » (liaisons fortes, potentiels effectifs, ...). En ce qui concerne les premières, la situation en France a évolué très favorablement ces dernières années. En effet, l'utilisation de ces approches pour aborder des problèmes relevant du domaine de la matière condensée a connu un formidable essor, y compris en matière d'avancées méthodologiques, de développement d'algorithmes et de logiciels (i.e. la spectroscopie d'états excités). Dans ce cadre, le GDR DFT a joué un rôle essentiel, tant dans le développement des méthodes que dans la structuration de la communauté concernée ... voire de toute la communauté des théoriciens et des numériciens, au-delà de la DFT. Malheureusement, la lourdeur des méthodes issues de la DFT en restreint pour l'instant l'utilisation à des systèmes « simples », aux échelles (temps, espace) les plus basses, même si des avancées sont en cours vers l'étude d'une matière plus complexe : nanotubes, verres, ... (Couplage entre dynamiques moléculaires quantique et classique, méthodes QM-MM issues de la Chimie Quantique).

Dans l'optique de simulations numériques appliquées à des matériaux réalistes, plus ou moins loin de l'équilibre, dans des conditions (température, pression, ...) variées, il n'est pas envisageable de compter sur ces seules méthodes *ab initio*. L'alternative est plutôt de les utiliser pour fonder les meilleurs potentiels (semi-empiriques) possibles, réalistes et adaptés aux types d'interaction mises en jeu (métaux, isolants, semi-conducteurs, systèmes moléculaires, ...). De ce point de vue, l'école française autour des « liaisons fortes » propose une alternative particulièrement bien adaptée pour fonder l'énergétique d'une liaison chimique pour une simulation numérique moderne en permettant de moduler le niveau de description de la structure électronique nécessaire au bon traitement du problème abordé, et ce tant pour les métaux et alliages que pour les covalents à base de carbone (nanotube, graphène, matrices poreuses d'électrodes, ...) ou de silicium. Dans le même ordre d'idée, la physique statistique des liquides et des colloïdes (en volume ou confinés) et plus globalement toute la physique-chimie ont grandement bénéficié de simulations basées sur des potentiels effectifs décrivant les interactions interatomiques, intermoléculaires ou inter-colloïdales avec des approches en théorie des perturbations. Dans cette optique un protocole incontournable en modélisation des matériaux semble être le suivant : structure électronique (*ab initio* et/ou liaisons fortes) → potentiels semi-empiriques → mécanismes élémentaires et mécanique statistique (Dynamique Moléculaire / Monte-Carlo à l'équilibre) → mécanismes effectifs → processus à grande échelle (Monte-Carlo cinétique). Qu'il s'agisse du développement des méthodes non *ab-initio* ou des approches couplées

(Dynamique Moléculaire ↔ Monte Carlo), la communauté française est bien armée, héritage d'une longue tradition culturelle en physique et chimie des solides et des liquides. Notons dans la dernière étape du protocole des avancées spectaculaires liées au développement des méthodes dites *meso-scale* comme les approches de type « Lattice Boltzmann » ou de « champ de phase » avec l'existence un GDR dédié. L'aspect « multi-échelle » est aujourd'hui le grand défi en science des matériaux, matière condensée et nanosciences. Pourtant, on ne trouve pas autour de l'ensemble de ces méthodes de structure fédératrice. Il existe certes des Journées annuelles de la Simulation Numériques (JSNum) qui permettent aux numériciens de se rencontrer de façon informelle, mais ce sont les ateliers (ou les écoles) du CECAM qui ont le plus souvent joué ce rôle de lieu institutionnel de rencontre pour la communauté de la simulation. A noter que le CECAM a maintenant quitté Lyon pour Lausanne, et que les « maisons de la simulation » seront un moyen d'assumer ce rôle d'animation scientifique.

STRUCTURATION DE L'ACTIVITE

Vaut-il mieux rassembler des théoriciens ou les saupoudrer dans des groupes expérimentaux ? Il n'existe bien sûr pas une réponse universelle, et des situations particulières peuvent générer des besoins (et donc des solutions) différents. Ceci dit, si l'on réfléchit en terme de politique globale, l'idée que les théoriciens doivent être regroupés devient toute à fait défendable, dans des ensembles de dimension bien sûr variables, depuis le petit groupe de modélisation d'un laboratoire à vocation essentiellement expérimentale, jusqu'au département d'un laboratoire de taille plus importante. L'enjeu essentiel est ici la visibilité internationale de ces groupes, en tant que spécialistes de la modélisation. Le risque de la dilution des théoriciens dans des groupes d'expérimentateurs est que l'activité théorie soit vécue (et développée) comme une prestation de service, forcément sclérosante à terme. Même auprès des grands instruments qui génèrent des données expérimentales dont l'interprétation nécessite absolument l'utilisation voire le développement d'outils de simulation numériques sophistiqués, il est apparu qu'il y avait plus à gagner à regrouper les théoriciens/numériciens dans des structures dédiées plutôt qu'à les rapprocher des dits-instruments, comme l'illustre la création de l'ETSF (European Theoretical Spectroscopy Facility) autour du développement de la théorie et de codes de calcul pour la détermination des excitations électroniques des matériaux et la prédiction de leurs propriétés spectroscopiques (en lien avec des expériences telles que la photo-émission, les pertes d'énergie d'électrons, la diffusion inélastique des rayons X ou encore l'optique linéaire et non-linéaire...). Le grand avantage de regrouper des théoriciens n'est pas seulement de leur permettre de prendre du recul par rapport au quotidien des expériences, mais aussi de les rendre plus forts par l'association de cultures, de compétences et d'outils différents, et plus efficaces par la mise en place de moyens de calculs dédiés performants. Ainsi, s'il est clair que l'activité de modélisation en matière condensée a vocation à nourrir (et à se nourrir de) la réalité expérimentale, elle doit pouvoir s'en éloigner ... même si c'est pour mieux y revenir. En ce sens, la création de « départements de théorie et modélisation » dans les

grands laboratoires paraît être le compromis le plus efficace pour favoriser la synergie entre théorie et expérience, tout en accordant à la première la possibilité de développer une recherche propre (développements méthodologiques en particulier).

A côté de ces départements et à condition d'assurer une cohérence thématique, on peut envisager de créer en France une structure qui permette de regrouper des numériciens de façon non pérenne en favorisant des échanges culturels plus larges sur des temps modulables et qui permettrait à des chercheurs français et étrangers de se rencontrer et d'interagir sur des temps limités, comme à l'ICTP (International Center for Theoretical Physics) de Trieste ou les différents Collaborative Computational Projects britanniques (<http://www.ccp.ac.uk/>) qui sont thématiquement très cohérents et qui ont des actions de formation très en pointe. Ceci afin de promouvoir la culture numérique chez une majorité de physiciens et la reconnaissance des aspects méthodologiques dans le domaine numérique en incitant au développement pérenne de logiciels de simulation (notamment pour des applications massivement parallèles, notamment hybrides (calcul parallèle/calcul sur carte graphique (GPU) qui ouvrent de grandes perspectives pour la modélisation multi-échelle et les calculs ab initio).

Les sujets de recherche porteurs d'avenir sont nombreux et peuvent être listés de manière non-exhaustive comme suit :

Modélisation « multi-échelle » (pour la plasticité, la poromécanique, ... en favorisant les activités qui s'efforcent d'associer plusieurs échelles différentes notamment pour les propriétés mécaniques, thermiques ou électriques, interface avec les sciences pour l'ingénieur)

Phénomènes coopératifs (transitions de phases, phénomènes de mouillage, propriétés dynamiques à travers les transitions de phase, phénomènes critiques dans les systèmes désordonnés, dynamiques lentes, transition vitreuse, transition de piégeage/dé-piégeage)

Transport (propagation des ondes, localisation, transport d'électrons, modélisation stochastique de recherche et de poursuite aléatoires intermittentes, transport fluidiques aux nano-échelles, superhydrophobie, micro-nageurs, autopropulsion, élasto-capillarité, interface entre dynamique des fluides, physique statistique et nanosciences.)

Au-delà de l'ordre cristallin (incommensurables, quasi-cristaux)

Matière sous conditions extrêmes (solides, liquides sous pression et température ou confinés, interface avec la physique du globe, la géologie, la chimie)

Physique des surfaces (croissance, auto-organisation, processus de croissance et comportement critique d'une interface en mouvement)

Agrégats, nanofils et autres « nano-objets » (effets de taille, depuis la structure électronique jusqu'aux propriétés mécaniques et thermodynamiques)

Interaction matière-rayonnement (matériaux sous irradiation)

Corrélations fortes (matériaux magnétiques, électronique de spin et nanomagnétisme, transitions de phase quantiques, supra magnétisme, effet hall quantique, interfaces avec la physique des atomes froids)

Fluides complexes (colloïdes, polymères, bio-matériaux, cristaux liquides, interfaces avec la chimie et la biologie)

Spectroscopies (excitations électroniques des matériaux, propriétés spectroscopiques, lien avec la photo-chimie et l'optique linéaire et non-linéaire).

Pour finir, on peut souhaiter que la direction de l'INP-CNRS affiche clairement la modélisation numérique parmi ses priorités en soutenant les équipes de recherche qui développent des activités bien identifiées dans ce domaine (postes de chercheurs et d'ITA) et soutienne les initiatives interdisciplinaires vers la Chimie, les Mathématiques, les Sciences pour l'Ingénieur et les Sciences de l'Univers.