Vers la mesure quantitative des propriétés mécaniques des matériaux polymères à l'échelle nanométrique : le rôle-clef de l'IA

Philippe LECLERE*

Laboratoire de Physique des Nanomatériaux et Energie – LPNE Institut de Recherche en Sciences et Ingénierie des Matériaux Université de Mons (UMONS) Avenue Victor Maistriau, 19, B - 7000 Mons (Belgique)

* philippe.leclere@umons.ac.be

Mots-clés: Microscopie à sonde locale, propriétés mécaniques, mélanges de polymères

Résumé:

Au cours des dernières décennies, les matériaux fonctionnels ont remplacé les matériaux existants dans de nombreuses applications, allant de l'aérospatiale à la cosmétique. Ces nouveaux matériaux devenus omniprésents ont un impact sur tous les aspects de nos vies. La cartographie à l'échelle locale, idéalement quantitative, de leurs propriétés physico-chimiques peut fournir des informations essentielles sur les processus fondamentaux qui mènent à des phénomènes de déformation dans ces matériaux ou à leur dégradation sous l'effet de contraintes mécaniques, thermiques ou électriques externes.

Au-delà de l'imagerie de surface, l'exposé se concentrera sur les derniers développements de la microscopie et la spectroscopie à sonde à locale pour la caractérisation des surfaces et des interfaces de matériaux polymères. Nous mettrons en évidence leurs capacités à caractériser les propriétés de ces matériaux avec une attention particulière sur la cartographie des propriétés nanomécaniques telles que l'adhésion, l'indentation, le module de rigidité, le module de stockage, le module de perte en utilisant diverses techniques récentes (*PeakForce Tapping, nanoDynamic Mechanical Analysis*). A titre d'exemple, nous illustrons notre exposé par de nombreux systèmes polymères (mélanges, nanocomposites, multicouches).

Plus récemment, grâce au couplage de la microscopie à sonde locale avec les spectroscopies optiques (infrarouge et Raman) ou la microscopie électronique, en plus des propriétés mécaniques, nous avons également accès aux propriétés chimiques locales.

Dans ce contexte, les techniques de *Machine Learning (ML)* ont été perçues comme des outils prometteurs pour la conception et la découverte de nouveaux matériaux. Nous aborderons brièvement les méthodes de calcul et les algorithmes de ML pouvant être utilisés pour détecter les différents domaines et (inter)phases dans les matériaux en partitionnant les observables (y compris spectroscopiques) enregistrées en fonction de leurs similitudes.

A titre d'exemple, nous décrirons des protocoles adaptés pour l'analyse des données (validation des acquisitions, segmentation des données, analyse corrélative, ...), dans l'espoir d'aider la communauté scientifique à mieux comprendre les paramètres clés dans l'optimisation du comportement des matériaux non seulement pour les aspects fondamentaux mais aussi pour des applications industrielles.

Dans l'avenir, cette approche algorithmique basée sur une analyse corrélative permettra d'analyser des matériaux multifonctionnels aux architectures plus complexes, ouvrant ainsi de nouvelles voies de recherche sur des matériaux avancés plus fiables et idéalement éco-responsables.