



SCIENCE ET INGÉNIERIE DES NOUVEAUX MATÉRIAUX

APPORTS DE L'IA
ET DES TECHNOLOGIES
QUANTIQUES

PRIMA 
Les matériaux pour avancer

PRIMA QUÉBEC, LE PÔLE DE **RECHERCHE** ET D'**INNOVATION** EN MATÉRIAUX AVANCÉS DU QUÉBEC



SOMMAIRE

Nous vivons dans une société où la technologie est présente dans toutes les sphères de nos vies. Pourtant, peu de gens savent que nombre de technologies modernes, dont le transistor, le laser, l'imagerie médicale, la navigation GPS et l'écran tactile, pour ne nommer que ceux-ci, tirent leur origine de découvertes fondamentales en science des matériaux reposant sur un ensemble unique de principes de la physique quantique.

Il est donc pertinent de se rappeler que les matériaux avancés, qui ont des propriétés spécifiques et souvent surprenantes, voire disruptives, et qui se trouvent derrière chaque produit, procédé ou système conçus ou mis en œuvre par des scientifiques (chimistes, physiciens, mathématiciens, informaticiens, etc.) et ingénieurs, sont le fruit d'une approche le plus souvent multidisciplinaire mobilisant l'intelligence collective.

Ensuite, il est important de noter que l'industrie manufacturière est un important producteur de données et, par conséquent, recèle un fort potentiel de transformation économique grâce à l'exploitation de ces données massives (*Big Data*) et l'intégration de l'intelligence artificielle (IA). Pour tirer avantage de l'IA, les entreprises doivent développer une stratégie autour de la donnée et de la numérisation de leurs différents procédés. Fort de ces constats et orientations, l'IA et la simulation numérique haute performance (HPC) peuvent contribuer à l'accélération de l'innovation, notamment dans la découverte de nouveaux matériaux et la compréhension des propriétés qui en résultent.

Par ailleurs, des avancées récentes importantes en théorie de l'information quantique et en informatique de calcul nous rapprochent de la construction de calculateurs quantiques pouvant résoudre des problèmes complexes, difficiles et hors de la portée des ordinateurs classiques. Les premiers domaines applicatifs pouvant tirer avantage des dispositifs actuels de calcul quantique incluent la chimie et la science des matériaux (physique de la matière condensée), la biologie moléculaire ainsi que la découverte de médicaments. Dans chacun de ces cas, la modélisation précise de la nature et la force des interactions moléculaires, en est la clé.

Dans ce court document, après avoir rappelé l'importance du développement de matériaux innovants dans l'évolution et la transformation de notre société, nous concentrerons notre analyse sur l'apport de l'IA et des technologies quantiques à l'avancement de la découverte et de la modélisation des matériaux avancés.

TABLE DES MATIÈRES

Introduction	4
Importance des matériaux avancés	5
Perspectives nouvelles pour la R-D sur les matériaux	7
Modélisation numérique des matériaux.....	9
- aux échelles de la physico-chimie	10
- aux échelles de la mécanique des matériaux	11
Apports du <i>Big Data</i> et de l'IA.....	12
Apports des technologies quantiques à l'émergence de matériaux innovants	15
Conclusion	22
Glossaire	23
Éléments de bibliographie	25



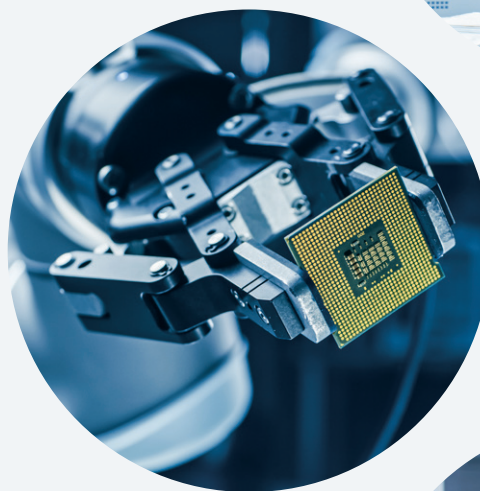
INTRODUCTION

Moteur d'innovation, les matériaux avancés ouvrent la voie au développement de nouveaux produits, de nouveaux marchés, et occupent une place importante dans l'évolution et la transformation de notre société du savoir, plus innovante et plus sobre en carbone.

Les matériaux avancés qui permettent d'améliorer les propriétés globales des systèmes dans lesquels ils sont intégrés, comptent parmi les principales technologies clés génériques de nos sociétés modernes, leur valeur et leur impact touchant l'ensemble des secteurs de notre économie.

Du fait de leur nature transversale et pluridisciplinaire, les technologies des matériaux avancés gagnent à être exploitées dans une approche intégrée visant à utiliser les combinaisons, convergences et fertilisations croisées entre ces mêmes technologies qui prennent leur source dans la science. La même exploitation peut être faite auprès d'autres technologies clés génériques, tels la micro- et nanoélectronique, la photonique, les nanotechnologies, les biotechnologies, l'intelligence artificielle, la robotique et les systèmes de fabrication avancés.

Le présent document vise à mettre en lumière des interactions et capacités de fertilisation croisée entre les matériaux avancés, l'IA et les technologies quantiques.





IMPORTANCE DES MATÉRIAUX AVANCÉS

De nombreuses problématiques industrielles sont étroitement liées à la conception et à la mise en œuvre de matériaux, et plus largement à l'intégration de la R-D en matériaux avancés au processus global d'innovation de différentes filières industrielles.

QU'ENTEND-ON PAR « MATÉRIAUX » ET « MATÉRIAUX AVANCÉS » ?

Les **matériaux** sont des matières d'origine naturelle ou artificielle, qui entrent dans la composition de tous les objets, machines et bâtiments qui nous entourent.

Les **matériaux avancés** sont définis comme étant tout nouveau matériau significativement amélioré qui permet d'obtenir un avantage marqué du point de vue de la performance, physique ou fonctionnelle, comparative-ment aux matériaux couramment utilisés et auxquels ils se substituent.

PERFORMANCES DES MATÉRIAUX AVANCÉS

PHYSIQUES	FONCTIONNELLES
Conductivité électrique	Revêtement glaciophobe/hydrophobe
Conductivité thermique	Matériaux autoréparants
Résistance mécanique	Verres à polarisation ajustable
Résistance à la corrosion	Biodégradabilité
Dureté	Biocompatibilité
Efficacité	Revêtement antimicrobien
Propriétés optiques	Matériaux électrochromes
Propriétés magnétiques	Adsorption-désorption de gaz (ex. CO ₂ , méthane)
Conversion d'une énergie en une autre (pyroélectriques, piézoélectriques, thermoélectriques)	Emballages actifs (ex. perméabilité/imperméabilité à l'eau, l'oxygène, l'éthylène)

Figure 1 : Performances physiques et fonctionnelles des matériaux avancés
Source : PRIMA Québec et P4BUS Systems

Les matériaux avancés sont très nombreux et diversifiés, et bénéficient à l'ensemble des secteurs industriels, comme en fait foi le tableau en Figure 2 tiré d'une analyse du marché des matériaux avancés en Europe et plus particulièrement aux Pays-Bas.

La recherche en sciences des matériaux contribue à générer des avancées dans la conception des matériaux de demain, performants et intelligents, et l'amélioration des performances physiques ou fonctionnelles de matériaux existants. Parmi les exemples d'avancées et d'amélioration, nous pouvons citer la distribution ou la taille des pores ou des particules dans les matériaux, leur microstructure cristalline ou amorphe, et les procédés de fabrication. D'autres avancées consistent également à concevoir et assembler de nouvelles façons des pièces multimatériaux, à les rendre moins chers ou à modifier leurs facteurs de forme.

La recherche et la résolution de problèmes complexes de procédés de mise en forme et de transformation des matériaux, pluridisciplinaires par essence, requièrent une étroite collaboration entre différents partenaires.

L'objectif final étant, à travers la maîtrise de domaines techniques et scientifiques, l'application de ces procédés de manière à obtenir les propriétés d'usage souhaitées : résistance mécanique, endommagement, fatigue, propriétés physiques, qualités de surface.

Poursuivre le développement de nouveaux matériaux nécessite en effet de relever de nombreux défis :

- Technologiques
- Économiques
- Environnementaux
- Sociaux/sociétaux/santé/sanitaires
- Énergétiques

MATERIALS IMPACT ON DUTCH TOP SECTORS

Netherlands' innovative top sector	NWO Materials Agenda								
	Coatings	Materials for circular economy	Electronic materials	Making and characterization	Designed materials	Energy materials	Bio-materials	Construction materials	Info-materials
Chemicals	●	●	●	●	●	●	●	●	●
High tech systems & materials	●	●	●	●	●	●	●	●	●
Life sciences & health	●	●	●	●	●	●	●		●
Logistics	●	●	●	●	●	●		●	●
Energy	●	●	●	●	●	●		●	●
Agri-food	●	●	●	●		●	●	●	●
Creative industries	●	●	●	●	●	●			●
Water	●	●	●	●	●	●	●	●	●
Horticulture & raw materials	●	●	●	●		●	●	●	

● Direct impact ● Indirect impact

Figure 2 : Impact des matériaux sur les secteurs clés aux Pays-Bas.
Source : government.nl, NWO.nl, Desk research, Roland Berger



PERSPECTIVES NOUVELLES POUR LA R-D SUR LES MATÉRIAUX

La science des matériaux s'appuie essentiellement sur quatre (4) éléments :

- Outils théoriques et méthodes algorithmiques
- Techniques de modélisation et simulation multiéchelles
- Techniques expérimentales
- Métrologie et méthodes de caractérisation (instrumentation/physique des contrôles non destructifs)

Historiquement, le temps requis pour passer de la découverte de nouveaux matériaux au marché était de 15 à 20 ans. Les avancées récentes au niveau de l'instrumentation scientifique et de la numérisation des laboratoires à l'aide de l'IA, de la robotique et du HPC permettent dorénavant de raccourcir le cycle d'innovation, d'accélérer le processus de découverte et de développement de matériaux nouveaux, réduisant par un facteur de 10, voire plus, les délais de mise à l'échelle de procédés et développement technologique dans le domaine.

Des algorithmes d'apprentissage machine permettent aussi d'analyser les données expérimentales en temps réel et de prédire d'autres réactions ou conditions de traitement afin d'optimiser sur-le-champ les résultats liés aux attributs, en guidant le prochain cycle d'expérimentation ou en « bouclant la boucle ». L'apport de l'IA dans la découverte accélérée de matériaux fera l'objet d'une section plus loin dans le rapport.

Des plateformes collaboratives de découverte accélérée jumelées à des outils de caractérisation, modélisation et simulation de matériaux ainsi que des bases de données mutualisées peuvent aussi être utilisées. Ces dernières s'appuient généralement sur l'accessibilité des données numériques en tant que produit de la recherche financée par des fonds publics. Plusieurs initiatives en ce sens se sont traduites dans les dernières années par la mise sur

de laboratoires autonomes adaptés à la conduite de projets collaboratifs, notamment pour les essais de synthèse et de caractérisation de matériaux, ainsi que la collecte de données d'expérience. Le programme Défi « Matériaux pour combustibles propres » coordonné par le Conseil national de recherches du Canada (CNRC) est un exemple de ce type d'initiative¹.

Ces nouveaux outils fondés sur le numérique ouvrent donc de nouvelles perspectives aux découvertes et la mise au point de nouveaux matériaux. Il s'agit en particulier de mettre en place des mécanismes de collaboration incitant différents acteurs R-D à partager les données d'expérience sur les matériaux en contrepartie de l'accès à des outils de modélisation et de simulation perfectionnés. Cette approche permet de s'enrichir mutuellement d'activités de conservation, d'analyse et de gestion des données, intégrant et donnant accès notamment aux corrélations avancées et aux méthodes de mesure de l'incertitude les plus en pointe. Un autre bénéfice attendu est la réduction de coût des technologies et matériaux qui sont développés grâce à ces collaborations.

Dans la province, selon le portrait le plus récent de l'écosystème des matériaux avancés dressé par PRIMA Québec², les tendances mondiales stimulant la demande en matériaux avancés s'inscrivent dans les axes suivants :

- Lutte aux changements climatiques et décarbonation de l'économie
- Défis liés à l'alimentation et la santé
- Croissance de la demande en énergie
- Pression sur les ressources hydriques
- Approvisionnement accru en ressources naturelles
- Défis liés à l'accroissement démographique
- Accélération numérique

¹ D'autres exemples sont répertoriés par l'OCDE dans sa publication 'Collaborative Platforms for Innovation in Advanced Materials'. Voir lectures recommandées en annexe.

² <https://www.prima.ca/materiaux-avances/portrait-des-materiaux-avances/>

Un exemple de matériau avancé aux propriétés intéressantes est les MOF (*Metal Organic Framework*). Ces matériaux synthétisés sont composés de métaux et de non-métaux. Ainsi, il est possible de faire varier les propriétés en changeant la partie métallique ou non métallique, ou en faisant varier la taille et la forme de la structure. Le défi est donc de trouver les bonnes combinaisons de ces paramètres afin d'obtenir un MOF qui a les propriétés désirées pour l'application voulue. En procédant par méthode traditionnelle, il est très long et coûteux de trouver le bon MOF, car il faut synthétiser chaque combinaison pour s'assurer des propriétés réelles. En procédant par les simulations, il devient beaucoup plus rapide de trouver la combinaison voulue. Cependant, seuls des HPC sont potentiellement

capables de simuler une grande quantité d'atomes et d'interactions, bien que cette capacité ne soit pas infinie. Pour simuler des MOF de plus grande complexité, il faudra utiliser des ordinateurs quantiques.

Parmi les applications potentielles des MOF, nous comptons le stockage, la purification et la séparation des gaz, la valorisation de la biomasse, le traitement de l'eau, les piles à combustible, la catalyse et la détection.

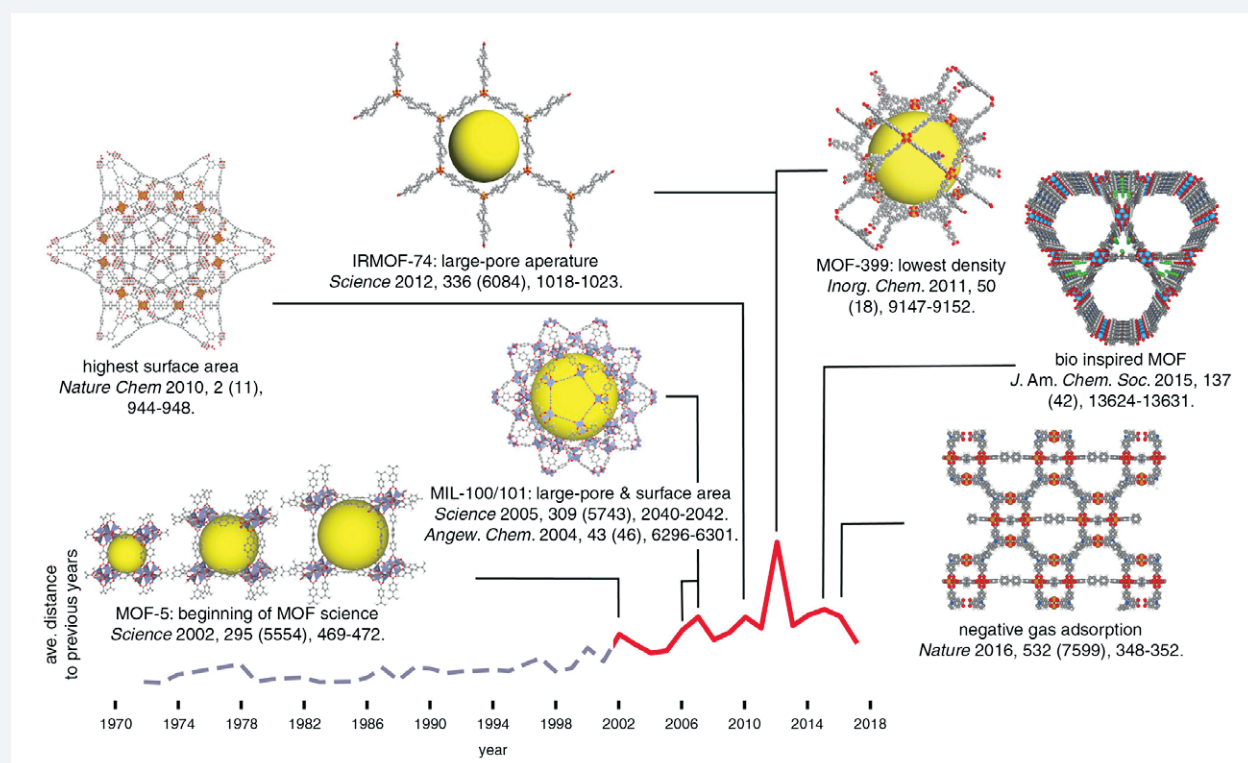


Figure 3 : Chronologie de l'évolution de la géométrie des MOF (Metal Organic Framework).

Source : Moosavi, SM et al [2020]. "Understanding the diversity of the metal-organic framework ecosystem", *Nature Communications*, 11, article 4068.



MODÉLISATION NUMÉRIQUE DES MATÉRIAUX

Le développement de matériaux innovants nécessite d'aller bien au-delà de l'intuition, car les phénomènes qui dictent les propriétés des matériaux avancés ne sont pas perçus à l'échelle humaine. Il faut donc disposer d'outils permettant de comprendre et prédire ce qui se passe au cœur même de la matière. La science et l'ingénierie des matériaux participent ainsi au décryptage des lois de la physique quantique régissant les interactions entre la matière et la lumière, par exemple.

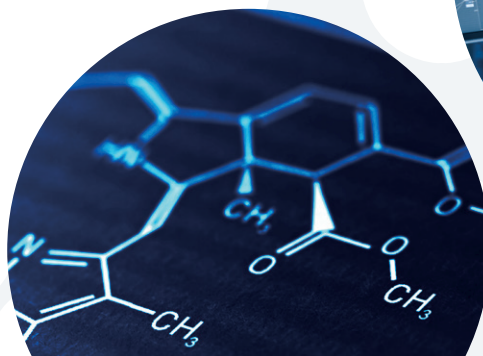
La nouvelle donne du développement des matériaux fait la part belle aux données numériques ainsi qu'à la coordination et la collaboration entre les acteurs de la R-D. Dans ce contexte, le développement de grandes bases de données constitue l'une des évolutions marquantes de la science des matériaux. La mutualisation des données d'expérience en augmente grandement la valeur. Les principaux pays en tête du palmarès de l'innovation dans le domaine des sciences et de l'ingénierie des nouveaux matériaux l'ont d'ailleurs bien compris.

Depuis 25 ans, les outils de modélisation et de simulation principalement centrés sur la compréhension et la prédiction du comportement des électrons ou des atomes ont évolué en fonction de la montée en puissance des calculateurs parallèles et de nouvelles méthodes numériques. Ces méthodes s'appuient sur la physico-chimie, dont les bases conceptuelles demeurent la physique statistique et la théorie quantique du « problème à n corps ». Ce problème relève de la prédiction et détermination des trajectoires de n objets qui sont en interaction gravitationnelle entre eux, comme notre système solaire. Ainsi, plus la quantité " n " augmente, plus il faut de puissance de calcul afin de résoudre les problèmes, car les interactions augmentent beaucoup plus rapidement que la quantité " n ".

La montée en puissance des moyens de calcul, des méthodes numériques et des techniques expérimentales permet aujourd'hui d'avoir accès à l'information locale de la matière, à différentes échelles, et de modéliser de manière plus ou moins fine le comportement des matériaux et leurs évolutions (Figure 4).

Pénétrer au cœur des matériaux pour en comprendre la structure et les propriétés est un défi de taille. En effet, comme montré dans la Figure 4, ce sont sept (7) ordres de grandeur qui doivent être appréhendés, en termes de distances spatiales, de l'ångström (10^{-10} mètres) au millimètre (10^{-3} mètres). Ces 7 ordres de grandeur se retrouvent aussi dans les énergies et températures mises en jeu.

Quant aux temps caractéristiques impliqués, ils varient sur des échelles encore plus larges, les plus fines s'appliquant aux échelles de la physico-chimie et les plus grandes à la mécanique des matériaux. Les deux échelles se rejoignent typiquement à l'échelle de la dynamique des dislocations. Ces dernières sont des défauts dans la structure cristalline d'un matériau qui se mettent en mouvement lorsque le matériau est sollicité ; ces mouvements induisent la déformation perçue macroscopiquement, résultat de la présence de dislocations microscopiques.



MODÉLISATION NUMÉRIQUE AUX ÉCHELLES DE LA PHYSICO-CIMIE

Comprendre et maîtriser l'interaction entre matière et lumière à l'infiniment petit ouvre un champ de possibilités immenses en innovation dans l'ensemble des secteurs industriels.

Au cours des vingt dernières années, les calculs de structure électronique se sont imposés comme outil universel pour prédire les propriétés des matériaux, exploitant la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité [cf. DFT de la Figure 4]. L'objectif principal de cette théorie est de remplacer la « fonction d'onde multiélectronique » (équation de Schrödinger) trop complexe pour être résolue analytiquement, par la densité électronique comme quantité de base pour les calculs. Les calculs de structure électronique fondés sur la DFT nécessitent un nombre important d'approximations, et restent donc limités à des « systèmes » assez simples. La possibilité de

traiter de plus grands systèmes et des échelles de temps longues requiert d'autres méthodes : méthodes *ab initio*, méthodes d'approximations, dynamique moléculaire, etc.

Comme mentionné, la science computationnelle des matériaux couvre de larges échelles de grandeurs et de temps. La Figure 4 démontre les méthodes computationnelles nécessaires pour résoudre des problèmes à différentes échelles de grandeur. De plus, il y est aussi démontré les échelles de temps correspondantes aux échelles de grandeur.

Des applications et propriétés sont aussi mises de l'avant dans la Figure 4, ce qui permet de comprendre l'impact réel de l'apprentissage machine et des technologies de simulations sur la découverte de matériaux avancés ayant de nouvelles propriétés (en bas à droite).

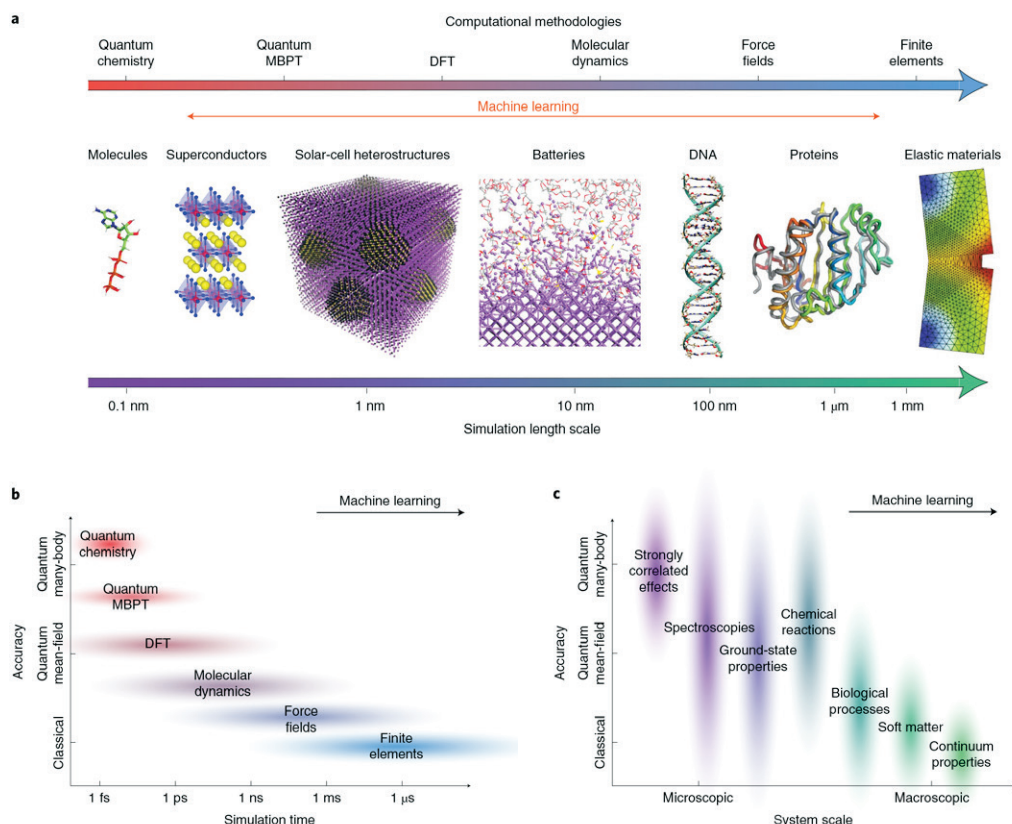


Figure 4 : Vue d'ensemble de la science computationnelle des matériaux.
Source : Louie, SG. et al (2021). "Discovering and understanding materials through computation", *Nature Materials*, 20, 728-735.

MODÉLISATION NUMÉRIQUE AUX ÉCHELLES DE LA MÉCANIQUE DES MATÉRIAUX

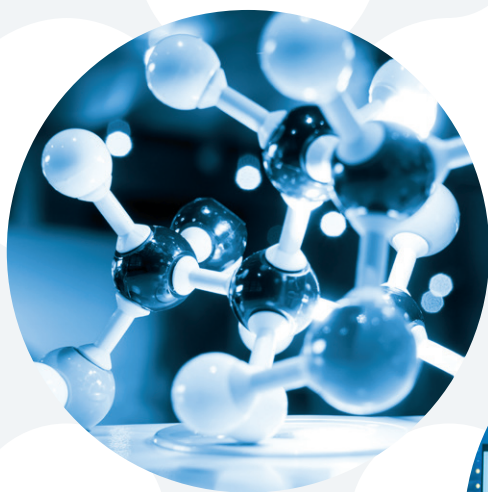
Comme mentionné, le monde des matériaux évolue à différentes échelles de temps et d'espace. Ainsi, il est possible de créer des simulations qui permettent l'échange d'information entre ces échelles ; ce sont les simulations multiéchelles.

Les méthodes utilisées incluent la dynamique moléculaire à l'échelle atomique et des méthodes d'éléments discrets aux échelles mésoscopiques et continues (élasticité, dynamique des dislocations, et des zones de cisaillement).

Aux échelles macroscopiques, pour mieux comprendre et maîtriser l'évolution des matériaux durant les étapes de fabrication de pièces, assemblages et systèmes, le design se fait à l'aide des méthodes d'éléments finis et autres outils mathématiques utiles à la mécanique des matériaux.

La conception est une démarche de type *top-down* et inductive. Elle est fondée sur des données brutes, réelles, et observables du monde physique. Les données utilisées sont le résultat d'expériences menées en laboratoire. Par opposition, les méthodes de modélisation et de simulation numérique aux échelles de la physico-chimie sont de type *bottom-up*. Cette dualité représente un défi important d'ingénierie pour la conception de pièces, assemblages et systèmes qui doit reposer, d'une part, sur les résultats des expériences et, d'autre part, sur les résultats des simulations réalisées à des échelles atomiques et mésoscopiques judicieusement sélectionnées. Ces défis sont étudiés pour des matériaux innovants par de nombreux groupes de recherche afin d'accélérer la découverte des matériaux qui ont les propriétés désirées.

Pour des matériaux standards et déjà certifiés, de nombreuses bases de données matériaux sont disponibles, que ce soit pour la fabrication de pièces métalliques, polymères ou composites. Pour les nouveaux matériaux, ces bases de données sont créées au fur et à mesure que la recherche avance.





APPORTS DU *BIG DATA* ET DE L'INTELLIGENCE ARTIFICIELLE

Le *Big Data* fait référence à des ensembles de données dont la taille dépasse la capacité de nombreux logiciels à collecter, organiser et analyser les données dans un temps raisonnable.

Les traitements de données de masse impliquent une nouvelle approche de calcul et de l'informatique. Cette approche inclut :

- Collecter et utiliser beaucoup de données plutôt qu'un petit nombre d'échantillons finement sélectionnés afin d'être représentatifs ;
- Accepter de traiter des données imparfaites ou mal organisées ;
- Renoncer à chercher des causalités au profit de la recherche de corrélations, de motifs (*patterns*) pouvant aider à prédire l'évolution et le futur d'un système dynamique complexe ;
- Avoir une tolérance aux incertitudes et au bruit.

Sommairement, cette approche de calcul est centrée sur la donnée dont les assises sont porteuses d'une meilleure adéquation au monde réel et ses incertitudes.

Avec cette description, on comprend mieux la nature et la portée des technologies IA qui carburent pour la plupart aux données massives.

L'IA et ses sous-domaines (Figure 5) ont véritablement pris leur envol à partir de 2012, avec la montée en puissance des réseaux neuronaux, soit les premiers systèmes artificiels capables d'apprendre par expérience à partir de masses importantes de données. Les réseaux neuronaux ont connu depuis cette date un essor fulgurant, en particulier auprès des grands acteurs du *cloud* et du Web. Ces entreprises voient d'un bon œil l'exploitation des données massives à leur disposition, notamment pour monétiser leurs produits phares en s'ajustant au plus près des exigences des consommateurs. À travers la collecte de données, les algorithmes de recommandation proposent à chaque requête d'utilisateur un contenu ciblé et personnalisé. De plus, puisque les algorithmes sont capables d'apprendre et de s'améliorer, le résultat ne devient que meilleur avec le temps.

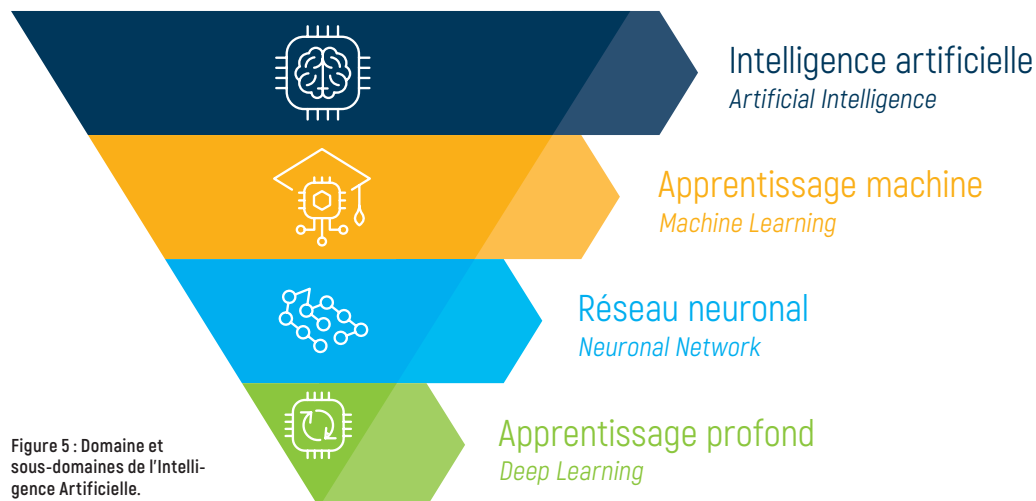


Figure 5 : Domaine et sous-domaines de l'Intelligence Artificielle.

Grâce à l'IA, et en particulier au *machine learning*, les systèmes informatiques embarquant des algorithmes prédictifs et de statistiques sont capables d'apprendre, en repérant des tendances ou des corrélations sur un très grand volume de données, et d'adapter leurs analyses et comportements et ainsi de créer leurs propres connaissances en fonction des résultats accumulés. Cela permet, par exemple, de proposer des prédictions très fines sur la consommation d'énergie, l'évolution d'un procédé industriel pour aider à la supervision, le comportement d'un bâtiment, etc. Plus les ordinateurs reçoivent de données, plus ils s'améliorent. Les règles prédictives qui en sont tirées ne sont toutefois d'aucune façon des lois générales. Elles sont basées sur les données recueillies et portées à évoluer avec celles-ci.

L'apprentissage automatique (*machine learning*) est une technologie IA permettant aux systèmes informatiques d'apprendre, de s'ajuster et de s'améliorer grâce aux données. L'apprentissage profond (*deep learning*) est la capacité d'un ordinateur à reconnaître des représentations (images, textes, vidéos, sons) à force de les lui montrer, de très nombreuses fois.

L'espace de conception des matériaux est d'une dimensionnalité telle qu'il est impossible de l'explorer en totalité, ce qui ouvre la voie à des approches numériques, couplant science des données (*Big Data*) et approches

d'apprentissage (*machine learning*). Parmi les techniques de *machine learning*, des avancées importantes dans les réseaux neuronaux (*neural networks*) ont permis de faire progresser énormément le domaine.

L'un des types les plus populaires de réseaux neuronaux profonds (Figure 6) est connu sous le nom de réseaux neuronaux convolutifs (CNN ou ConvNet). Un CNN convolue les caractéristiques apprises avec les données d'entrée et utilise des couches convolutives 2D, ce qui rend cette architecture bien adaptée au traitement des données 2D, telles que les images.

Les CNN éliminent la nécessité d'une extraction manuelle des caractéristiques. Pas besoin d'identifier les caractéristiques utilisées pour classer les images. Le CNN fonctionne en extrayant les caractéristiques directement des images. Les caractéristiques pertinentes ne sont pas préformées ; elles sont apprises pendant que le réseau s'entraîne sur une collection d'images. Cette extraction automatique des caractéristiques rend les modèles d'apprentissage profond très précis pour les tâches telles que la séparation et la classification des objets.

En intégrant la rétroaction d'experts matériaux durant l'étape d'entraînement, il devient possible d'explorer davantage ce même espace multidimensionnel de conception des matériaux.

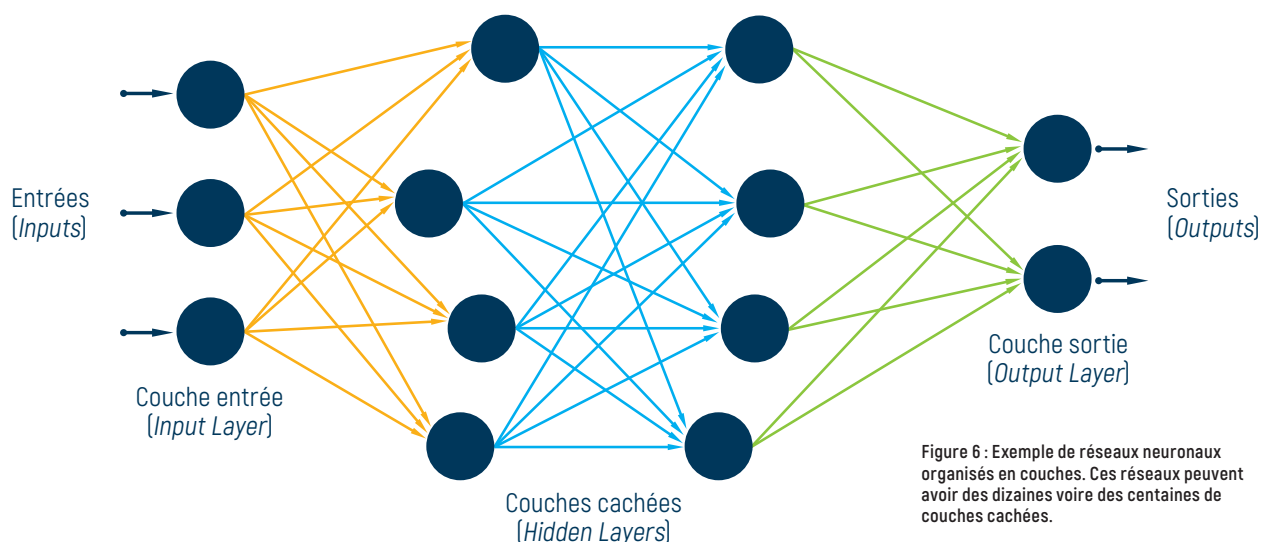


Figure 6 : Exemple de réseaux neuronaux organisés en couches. Ces réseaux peuvent avoir des dizaines voire des centaines de couches cachées.

Plus largement, les technologies de l'IA promettent d'automatiser l'ensemble du cycle de conception, de la recherche de nouveaux matériaux jusqu'au prototypage et l'optimisation des procédés. Parmi les apports importants de l'IA au domaine des matériaux avancés, les cas suivants sortent du lot :

- Analyse d'images pour aider à la détection de défauts de la structure atomique et plus largement pour accélérer les développements en « microscopie computationnelle » permettant de sonder la matière dans des dimensions infiniment petites ;
- Cibler *in silico* les meilleurs matériaux candidats avant de passer à l'échelle expérimentale (gain de temps et baisse/réduction des coûts) ;
- Extension du modèle des réseaux neuronaux convolutifs (CNN) aux données tridimensionnelles pour construire et identifier des groupements (clusters) à partir de données de structures cristallines (réseaux neuronaux convolutifs 3D) ;
- Méthodes algorithmiques permettant, à partir de données brutes, l'extraction de caractéristiques principales dans des espaces de variables de grande dimension (ex. : sélection de descripteurs de formes organisées pour représenter des matériaux comportant des structures 2D, 3D ou ND) ;
- Rechercher dans des banques de données matériaux (ex : alliages, aciers, MOFs) pour identifier les candidats les plus appropriés parmi des centaines, des milliers, voire des dizaines de milliers de formulations ;
- Comprendre et utiliser le langage naturel pour analyser des textes et arriver à répondre à des requêtes variées, en particulier pour la recherche d'articles scientifiques sur des sujets de R-D bien précis ;
- Conception et mise sur pied d'un laboratoire de physico-chimie entièrement automatisé/autonome .

Ce chimiste robotisé, mis au point par l'équipe du professeur Andrew Cooper, est guidé par des algorithmes qui l'aident à choisir quelles molécules synthétiser et tester parmi 98 millions de possibilités³.

Une application comme celle-ci permet de découpler le travail possible par un chercheur humain et donc d'arriver beaucoup plus rapidement à la synthèse de la molécule recherchée. Il n'est pas exagéré de penser qu'il sera éventuellement possible d'avoir des dizaines de laboratoires comme celui-ci, afin de synthétiser et de tester constamment de nouveaux matériaux aux propriétés toujours plus intéressantes.



³ <https://www.quebecscience.qc.ca/technologie/decouverte-materiaux-labo-autonome/>



APPORTS DES TECHNOLOGIES QUANTIQUES À L'ÉMERGENCE DE MATÉRIAUX INNOVANTS

QUELQUES CONCEPTS FONDAMENTAUX

Avec les avancées et découvertes des dernières années, nous entrons maintenant dans une nouvelle révolution quantique (Quantique 2.0). Cette révolution aura vraisemblablement encore plus d'impact que la première (Quantique 1.0). Des exemples technologiques de la révolution Quantique 1.0 incluent les lasers et les transistors, deux éléments qui sont des piliers fondamentaux sur lesquels nous avons pu construire tout un éventail de technologies modernes. La révolution Quantique 2.0 permettra de développer des technologies qui ne font pas présentement partie de l'imaginaire commun. Ces technologies utiliseront des phénomènes du monde quantique qui sont présentement en train d'être apprivoisés, notamment le contrôle et la manipulation des états quantiques de particules élémentaires isolées (électrons, ions, atomes, photons) ; ce faisant, il devient possible d'exploiter la logique étrange du monde quantique dans le traitement de l'information (qubits).

De plus, il est intéressant de noter que le Québec et le Canada sont bien positionnés pour tirer leur épingle du jeu de cette nouvelle révolution naissante et créer une filière industrielle puissante et prospère. En effet, la recherche universitaire est historiquement très forte dans le pays, et les premières filières qui sont perçues comme étant propices à l'adoption des technologies quantiques sont aussi des filières fortes à travers le pays. Il y a aussi une volonté gouvernementale de développer ce secteur, à travers différents programmes de financement et de collaboration.

En raison de la nature complexe de certains problèmes, ceux-ci seront les premiers à bénéficier des avancées technologiques offertes par la puissance de calcul de l'ordinateur quantique. Par exemple, des applications en physique des matériaux, en mécanique des fluides, en mécanique moléculaire et en chimie sont parmi les premières ciblées par un grand nombre de chercheurs, de *startups* et d'industriels. La puissance supérieure de calcul permettra la découverte de nouveaux matériaux et notamment la modélisation de grands ensembles de particules par des simulateurs quantiques. Il sera ainsi possible de simuler des phénomènes qui sont trop complexes pour les machines actuelles.

CODAGE : DE L'ANALOGIQUE AU NUMÉRIQUE ET INVERSEMENT

Bien que nous associions le codage et le stockage de l'information à des technologies créées par les humains, de nombreux exemples sous forme physique se manifestent dans la nature. Le monde du vivant repose sur un système très efficace de gestion de l'information. L'ADN et l'ARN messenger en sont de bons exemples. L'ARN messenger sert d'intermédiaire entre le code génétique de l'ADN et l'activité de la cellule, notamment pour la production de protéines.

Il en va de même dans la matière, à l'échelle atomique. Les travaux fondateurs de la physique quantique ont postulé que la matière n'émet jamais d'énergie (lumière) de manière continue, mais plutôt par « paquets », les quantas. C'est cette propriété de la matière qui assure la stabilité de l'atome et la solidité de la matière. C'est également cette propriété de la matière qui permet aux particules de conserver un état quantique... et donc de pouvoir coder/stocker de l'information. C'est enfin cette propriété qui a donné son nom à la mécanique quantique.

UN NOUVEAU PARADIGME

Le domaine des technologies quantiques progresse rapidement. La mécanique quantique et la théorie de l'information quantique ont ouvert un nouveau paradigme du traitement de l'information qui s'avère très prometteur.

Grâce à de nombreux travaux fondamentaux sur les architectures et briques matérielles de l'informatique quantique (les qubits, le nom provient de la fusion de « quantique » et « bit »), de nombreuses classes de problèmes et applications tirent un avantage marqué des calculateurs quantiques par rapport aux ordinateurs classiques. Les applications possibles se multiplient, portées par des *startups* et industriels en mesure de réunir les compétences et connaissances transdisciplinaires dans l'un ou l'autre des champs de recherche majeurs :

- Communications et la cryptographie quantique
- Simulation quantique
- Calcul quantique
- Capteurs et la métrologie quantique

Ces quatre (4) grands domaines de recherche, souvent appelés piliers des technologies quantiques, partagent les mêmes bases, à savoir la capacité de créer, manipuler et contrôler les états quantiques individuels d'objets élémentaires (électrons, atomes, photons) composant la matière à l'échelle atomique.

Le contrôle et l'ingénierie des systèmes quantiques passent donc par une formulation mathématique et le développement d'outils permettant de faire interagir des particules entre elles et la capacité d'exploiter pleinement les propriétés de superposition et d'intrication des particules pour des fins de codage/décodage de l'information.

La révolution quantique dite 2.0 est donc en marche. Elle repose sur la maîtrise d'états quantiques à l'échelle atomique et subatomique de la matière et profitent des aujourd'hui à de nombreux industriels (Figure 7) pour résoudre des problématiques de taille comme de nombreuses reliées aux changements climatiques (des exemples sont disponibles ci-après dans la Figure 8).

		Superconductors	Ion traps	Photonics	Quantum dots	Cold atoms
% of potential users who consider technology "promising"		61%	35%	34%	26%	16%
Qubit quantity ⁴	Qubit lifetime	~1 ms	~50+ s	N/A	~1-10 s	~1 s
	Gate fidelity	~99.6%	~99.9%	~99.9%	~99%	~99%
	Gate operation time	~10-50 ns	~1-50 µs	~1 ns	~1-10 ns	~100 ns
Connectivity		Nearest neighbors	All-to-all	All-to-all ⁵	Nearest neighbors	Near neighbors
Strengths		✓ Engineering maturity ✓ Scalability ⁶	✓ Stability ✓ Gate fidelity ✓ Connectivity	✓ Horizontal scalability ✓ Established semiconductor tech	✓ Stability ✓ Established semiconductor tech	✓ Horizontal scalability ✓ Connectivity
Challenges		✗ Near absolute zero temperatures ✗ Connectivity limitation in 2D	✗ Gate operation time ✗ Horizontal scaling beyond one trap	✗ Noise from photon loss	✗ Requires cryogenics ✗ Nascent engineering	✗ Gate fidelity ✗ Gate operation time
Example players		IBM, Google	Honeywell, IonQ	PsiQuantum, Xanadu	Intel, SQC	ColdQuanta, Pasqal

Figure 7 : État actuel de l'avancement des technologies quantiques en matière de matériel.

Source : BCG Consulting (<https://www.bcg.com/fr-fr/publications/2021/building-quantum-advantage>) consulté le 25 mars 2022.

⁴ Best reported performance available for all dimensions.

⁵ PsiQuantum publication (March 2021).

⁶ IBM and Google have announced 1M qubit roadmaps for between 2025 and 2030.

	Solar energy [11]	Wind energy [12, 13]	Batteries [14]	Industrial processes [15]	Materials for the grid [16]	Synthetic fuels (incl. electrolysis) [17]	CO ₂ capture [18, 19]	Atmospheric science [20]	Nuclear power [21]	Structural materials [4]	Biological enzymes [22]	Plastics & circular economy	Agriculture
Gas-phase electronic structure [23]	–	–	–	●	–	●	●	●	–	–	–	●	●
Molecular dynamics [24]	–	–	●	●	–	●	●	●	–	–	●	●	●
Solution chemistry [25]	–	–	●	–	–	●	●	●	–	–	●	●	●
Transition metal elements [26]	●	●	●	●	●	●	–	–	●	●	●	●	–
Lanthanides & actinides [27]	●	●	●	●	●	●	–	–	●	●	–	–	–
Electronic band structure [28]	●	–	●	–	–	●	–	–	–	–	–	–	–
Electron/hole diffusion constants [28]	●	–	●	–	–	●	–	–	–	–	–	–	–
Vibrational and vibronic structure [29, 30]	●	–	●	●	–	●	●	●	–	–	●	–	●
Magnetism [31]	●	●	–	●	●	–	–	–	●	–	–	–	–
Nuclear structure and reactions [32]	–	–	–	–	–	–	–	–	●	–	–	–	–
Excited states of a Hamiltonian [33–36]	●	–	–	●	–	●	–	●	●	–	●	●	●

Figure 8 : Simulation quantique de matériaux et de la chimie pour des technologies liées au climat. Les nombres entre crochets sont les articles référencés, accessibles sur le document. Source : <https://doi.org/10.48550/arXiv.2107.05362>.

Des avancées récentes importantes en informatique quantique, et notamment dans le développement de nouvelles architectures informatiques associant processeur quantique et mémoire quantique permettent une manipulation cohérente de qubits (unités de calcul). Par exemple ces qubits peuvent être matérialisés sous la forme de supraconducteur, d'ion piégé, de photon ou d'atome, actifs pendant un certain temps (temps de cohérence) [cf. Figure 7]. Ces qubits ont un état quantique qui leur permet de posséder une infinité de valeurs en théorie, mais ils sont aussi très fragiles puisqu'ils ne supportent pas le contact avec le monde macroscopique. Il est important de noter que le temps de cohérence, soit le temps pendant lequel l'état quantique et l'information sont maintenus, est un des défis principaux du développement de cette technologie, et des avancées sont faites chaque année.

Il est important de rappeler que les matériaux avancés sont au cœur de la recherche et du développement de propriétés, systèmes et ordinateurs quantiques, et hébergent ainsi tout espoir pour propulser la révolution quantique 2.0. (Figure 7)

Ces avancées, ainsi que plusieurs autres nous rapprochent de la construction d'un ordinateur quantique pouvant résoudre une série de problèmes difficiles et hors de la portée des ordinateurs classiques. Comme mentionné précédemment, les premiers domaines applicatifs qui pourront bénéficier déjà des dispositifs actuels de calcul quantique incluent la chimie et la science des matériaux (physique de la matière condensée), la biologie moléculaire ainsi que la découverte de médicaments. Ces domaines sont les premiers visés, car la limitation principale actuelle est bel et bien la puissance de calcul des ordinateurs classiques.

Les ordinateurs quantiques pourraient offrir des capacités révolutionnaires en matière d'optimisation et d'apprentissage automatique. Ils ont également la capacité inégalée de simuler efficacement des systèmes quantiques, puisqu'ils sont eux-mêmes des systèmes quantiques. Un des mécanismes exploités par ces systèmes relève de l'utilisation des amplitudes de probabilité distribuées plutôt que de travailler par des décisions oui-non séquentielles (le binaire classique). Ils ont donc le potentiel de résoudre des problèmes qui sont bien au-delà de la portée des machines d'aujourd'hui.

À part les domaines mentionnés précédemment, l'informatique quantique pourrait contribuer à des solutions qui changent la façon dont est générée et stockée l'énergie qu'elle soit nucléaire, solaire ou éolienne ; comment sont construits des maisons, des voitures, des navires et des avions ; comment est alimenté le transport et même comment concevons-nous des processus industriels de longue date tels que la fabrication de ciment, d'acier de plastiques et d'engrais ?

Pour contrecarrer les dérèglements climatiques qui présentent une menace potentielle pour les écosystèmes de la Terre, certaines stratégies nécessitent de résoudre un large éventail de problèmes complexes dans les domaines de la science, et de l'ingénierie. Les technologies quantiques (Figure 8) sont déjà utilisées (des algorithmes notamment) comme outils pour diagnostiquer et aider à contrer ces effets du changement climatique.

De plus, des avancées récentes, notamment dans le développement d'architectures hybrides de calcul combinant des composants classiques et des composants de calcul quantiques ouvrent la porte à une montée en puissance et en maturité de calculateurs quantiques pouvant résoudre de nombreux problèmes complexes présentement hors de la portée des ordinateurs classiques. Les contributions les plus importantes des technologies quantiques à la découverte et au design de matériaux avancés sont les suivantes :

1. Calcul et ordinateurs quantiques

- Reformulation de problèmes complexes liés à la nature multiphysique et multiéchelle de la simulation des propriétés de matériaux innovants ;
- Accélération de calculs sur certains types de problèmes, voire sur une seule tâche (ex. : manipulation de graphes) ;
- Meilleure compréhension des structures et des propriétés dans les matériaux incorporant des états quantiques fortement corrélés (propriété magnétique, supraconductrice) ;

- Par des capacités d'accélération de calcul ciblées, améliorer la performance des méthodes/outils d'intelligence artificielle permettant de développer et optimiser des procédés industriels et de fabrication avancée ;
- On peut utiliser le calcul quantique pour exécuter des algorithmes de *machine learning* et même des réseaux de neurones. Il est important de noter toutefois que l'ordinateur quantique n'est pas adapté à un large volume de données en entrée/sortie ;
- Évolution de certains algorithmes classiques entraînés à modéliser les données d'un système quantique ;
- La simulation quantique de systèmes à n-corps s'appuyant sur le calcul quantique devrait être la grande gagnante et permettre de : modéliser – comprendre – prédire par une approche analogique les réseaux d'atomes avec interaction ;
- Comblent les lacunes des outils de modélisation et de simulation dynamique actuels utilisés dans les laboratoires académiques, gouvernementaux et de l'industrie afin d'étudier les propriétés des systèmes complexes, loin de leur équilibre, en particulier le fossé entre les théories purement mathématiques et les expériences.

Les « simulateurs quantiques » sont appelés à jouer un rôle central et moteur dans l'évolution des plateformes et outils de modélisation et simulation où l'informatique classique et la simulation numérique atteignent leurs limites. Une nouvelle génération de simulateurs à base d'atomes neutres ou d'ions en cours de développement est très prometteuse.

Des méthodes de calcul développées sur calculateurs ou émulateurs quantiques, telles qu'évoquées ci-haut (quantum-inspiré), pourront s'avérer déjà prometteuses et intéressantes pour la communauté de l'IA et de la recherche opérationnelle regroupée autour d'IVADO, du CRIM, du DIRO, du Mila et autres acteurs québécois de l'informatique du *Big Data* et de l'IA, du calcul scientifique et du calcul stochastique.

2. Capteurs quantiques et métrologie

- Redéfinition de l'ensemble des mesures du Système International (SI) sur des grandeurs physiques qui s'appuient sur des phénomènes quantiques ;
- Développement de nouvelles technologies de métrologie permettant de sonder des matériaux à des échelles microscopiques ou plus petites (Figure 9) ;
- Mise sur pied de laboratoires virtuels permettant la sélection de nouveaux matériaux candidats et l'automatisation de la planification et la conduite d'expériences numériques en phase exploratoire pour la simulation de phénomènes complexes. Ceci raccourcirait les délais de recherche et développement, en plus d'en réduire considérablement les coûts.

MATERIAL	SENSING TARGETS	POSSIBLE FOSSIL ENERGY APPLICATIONS
Diamond vacancy centers, hexagonal boron nitride	Temperature, electric field	Pipeline integrity, temperature in transformers and power plants, powerline safety
Diamond vacancy centers, SiC vacancy centers, rare earth doped solids	Temperature, magnetic field, electric field, strain, pressure	Pipeline integrity, temperature in transformers and power plants, powerline safety
Diamond vacancy centers	pH, redox potential, magnetic ions, motion	Corrosion monitoring, valuable ion recovery
SiC vacancy centers	Strain, acoustic waves	Pipeline integrity
SiC vacancy centers	Magnetic field, strain, temperature	Temperature in transformers and power plants, powerline safety
Cold atoms	Gravity, inertia, velocity	Oil and gas exploration
Atomic vapors, trapped ions	Time	Oil and gas exploration

Figure 9 : Exemples de capteurs et de matériaux quantiques dans le domaine de l'énergie⁷

⁷ Quantum Sensing for Energy Applications: Review and Perspective S. E. Crawford, R.A. Shugayev, H.P. Paudel, P.Lu, M. Syamlal, P. R. Ohodnicki, B. Chorpeneing, R. Gentry, and Y. Duan, Adv. Quantum Technol. 2021, 4, 2100049.

3. Cas particulier des « matériaux quantiques »

Le terme « matériaux quantiques » désigne des matériaux complexes, développés par des spécialistes (physiciens, mathématiciens, informaticiens, ingénieurs) et dont les propriétés souvent inusitées ne peuvent être comprises et maîtrisées qu'à l'aide des lois de la physique quantique. Un facteur de complexité supplémentaire est qu'il faut tenir compte des interactions entre un grand nombre d'atomes, or ce sont précisément les technologies quantiques qui permettront d'obtenir la puissance nécessaire pour y arriver. De plus, les propriétés inusitées (par exemple la supraconductivité) ne peuvent être comprises par des modèles simples qui font intervenir qu'un atome ou qu'un électron à la fois, mais requièrent plutôt une prise en compte des effets « collectifs » d'un grand nombre d'électrons en interaction constante.

Un autre exemple d'application concrète est celui mentionné précédemment, soit les MOF. Avec la puissance de calcul supplémentaire amenée par les ordinateurs quantiques, il devient possible de modéliser des MOF plus complexes, avec de plus grosses structures et d'en identifier les propriétés selon les interactions calculées. Ainsi, il deviendra possible de découvrir des MOF aux propriétés qui sont pour l'instant inconnues.

Les familles de matériaux quantiques (Figure 7) font appel aux notions de systèmes corrélés, émergents ou à n-corps introduits précédemment dans le document. Ces matériaux quantiques peuvent être utilisés comme matériaux de base, mais aussi, et surtout, par leur grande valeur ajoutée, dans de très nombreux produits finis et semi-finis, et procédés et instrumentation⁸.

Entre autres, ces matériaux peuvent être utilisés pour des :

- Dispositifs de calcul et de mémoire permettant d'exploiter le parallélisme massif de calculateurs, ordinateurs, simulateurs encodant l'information selon des paradigmes bien différents de matériel informatique classique ;
- Capteurs de haute précision capables d'exploiter la précision de l'atome pour mesurer des paramètres physiques avec une résolution spatiale également de l'ordre de l'atome (Figure 9) ;
- Dispositifs de communication capables d'exploiter les propriétés quantiques de transmission sécurisée.

⁸ Pour un survol plus complet des usages, consulter <https://www.prima.ca/materiaux-avances/definition-des-materiaux-avances/>

LES SYSTÈMES CORRÉLÉS

On dit de deux particules, par exemple des électrons qu'ils sont corrélés s'ils « jouent collectif », en raison de leurs interactions, plutôt qu'individuel.

POURQUOI ÉTUDIER LES SYSTÈMES CORRÉLÉS ? PRINCIPALEMENT POUR 3 RAISONS :

Ils représentent une grande partie des matériaux naturels ou artificiels sur notre planète, par exemple, les métaux de transition et les terres rares (les oxydes composés de métaux de nickel, fer, zinc, chrome et cobalt ont de bonnes chances d'être corrélés) ;

Nombre de ces matériaux présentent des propriétés physiques uniques et très utiles tels le ferromagnétisme ou l'antiferromagnétisme, la supraconductivité, la magnétorésistance, etc. liées à la capacité des électrons d'une couche atomique de se délocaliser hors de leur orbitale dans le réseau métallique ;

Enfin et surtout parce que l'effet des corrélations engendre une grande variété d'états des formes organisées de la matière... très éloignés des métaux ou des isolants standards. C'est le lien entre ces corrélations et ces nouveaux états que les scientifiques et ingénieurs en matériaux avancés cherchent à mieux comprendre.

ARCHITECTURES DE CALCUL HYBRIDES

Les données sont omniprésentes et désormais des architectures de calcul hybrides combinant des processeurs centraux, des accélérateurs IA (graphique et tenseur) ainsi que des coprocesseurs quantiques sont désormais à prévoir en modélisation et simulation de nouveaux matériaux avancés.

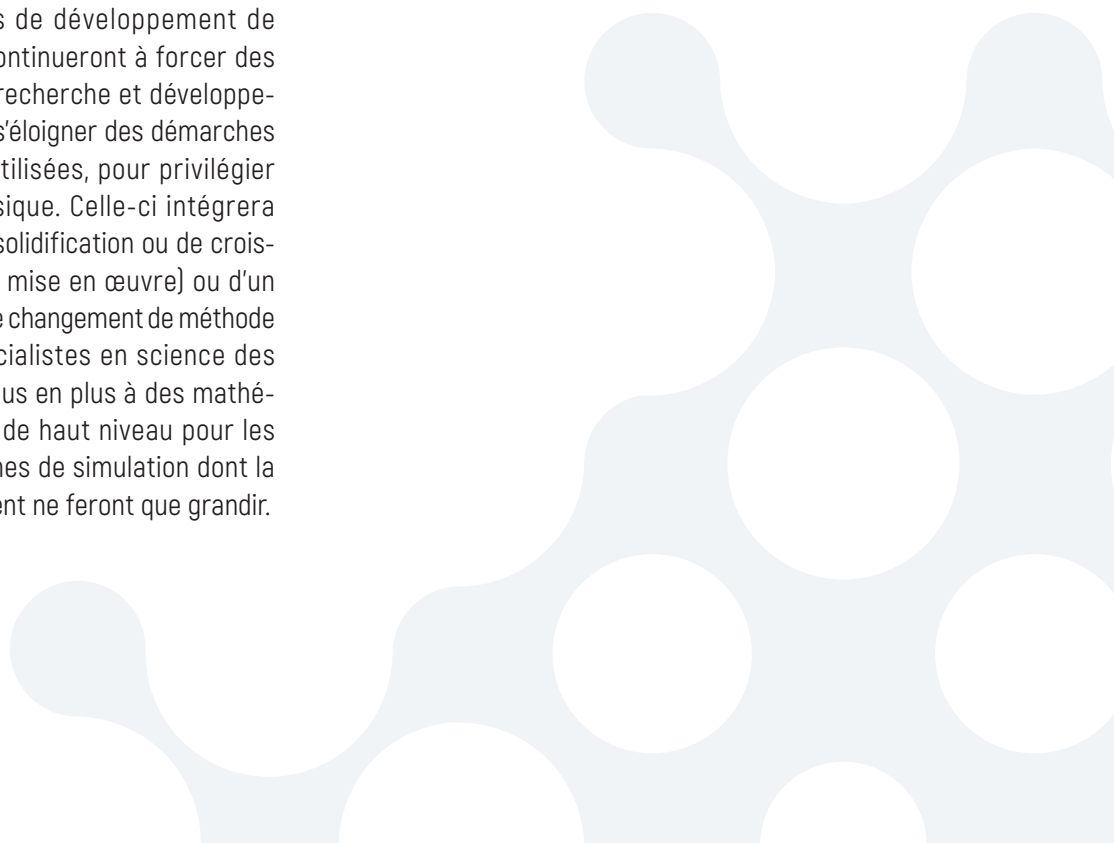
Le cas particulier des matériaux quantiques mérite de la part des industriels une attention particulière étant donné l'ouverture de nouveaux champs du possible, le fort potentiel d'innovation et les nouveaux usages qui peuvent être associés à de nouveaux systèmes quantiques qu'incarnent les qubits.

Pour les industriels et leurs scientifiques et ingénieurs spécialistes en matériaux, il s'agit de déterminer et de mettre en œuvre une architecture de calcul hybride, ainsi que des outils de programmation et une algorithmique adaptés aux ressources de calcul à leur disposition pour leur modélisation et de simulation des matériaux. Cela représente sans doute la voie à suivre pour se doter d'outils numériques performants permettant d'améliorer l'analyse et la compréhension de nouveaux matériaux aux propriétés techniques ou fonctionnelles inédites.

Les exigences industrielles de développement de matériaux « sur mesure » continueront à forcer des changements du côté de la recherche et développement. Par exemple, il faudra s'éloigner des démarches empiriques présentement utilisées, pour privilégier la modélisation à base physique. Celle-ci intégrera l'ensemble d'un procédé (de solidification ou de croissance, de mise en forme, de mise en œuvre) ou d'un système dans sa démarche. Ce changement de méthode de travail poussera les spécialistes en science des matériaux à faire appel de plus en plus à des mathématiciens et informaticiens de haut niveau pour les aider à résoudre les problèmes de simulation dont la complexité et l'entrecroisement ne feront que grandir.

**'NATURE ISN'T CLASSICAL,
DAMMIT, AND IF YOU WANT
TO MAKE A SIMULATION
OF NATURE, YOU'D BETTER
MAKE IT QUANTUM
MECHANICAL.'**

- Richard Feynman





CONCLUSION

Le développement de nouveaux matériaux est une étape en amont essentielle à un bon nombre de développements technologiques. Plus largement, les matériaux avancés se retrouvent au cœur de la chaîne de création de valeur des entreprises, et notamment de leur avantage compétitif et leur capacité à répondre de façon durable aux besoins de leurs clients et de la société.

Les grands acteurs industriels, et plus particulièrement ceux dont les applications et produits s'appuient sur une maîtrise des connaissances, compétences et moyens de fabrication et de caractérisation de nouveaux matériaux doivent continuer à s'investir dans le développement de nouveaux matériaux fonctionnels et l'optimisation des procédés industriels pour les mettre en œuvre.

Le présent rapport explore le rôle central qu'exercent les technologies IA et quantiques comme force habilitante et moteur dans la découverte et le développement de nouveaux matériaux avancés, de procédés innovants intégrant des matériaux à haute performance ainsi que dans le développement d'équipements ou systèmes associés à la production et/ou à la caractérisation des matériaux avancés à fort impact. L'accès à des bases de connaissances orientées matériaux et procédés est central dans la chaîne de valeur à construire dans plusieurs filières industrielles.

De nouvelles méthodes d'analyse de données multiphysiques et multiéchelles seront à développer, notamment pour bénéficier d'avancées régulières en microscopie computationnelle. Également, afin de développer des méthodes valides qui soient adaptables à différentes architectures de calcul, notamment hybrides (un mélange de classique et quantique), des défis d'intégration exigeront de créer et/ou renforcer les liens entre chercheurs en mathématiques, informatique et sciences applicatives, et de favoriser une grande collaboration entre ces acteurs dans les différents maillons de la chaîne d'innovation.

Le calcul haute performance est devenu cette dernière décennie le fidèle allié tant du chercheur que de l'ingénieur en matériaux, à l'ère d'une science pilotée de plus en plus par les données (*Data-driven Science*). L'intelligence artificielle et le quantique représentent dans ce contexte et cet écosystème d'innovation des ruptures technologiques importantes et un changement de paradigme majeur. L'impact combiné de la montée en puissance de l'IA et du quantique, qui se décline dans les travaux de R-D de manière riche et complexe est en voie de révolutionner la recherche et la découverte de nouveaux matériaux. Cette puissance du numérique, multiplexant connaissances en physique, chimie, mathématiques et informatique et favorisant l'émergence de compétences collectives nouvelles doit être mise au service de la société et de l'environnement.



GLOSSAIRE

1D, 2D, 3D, ND : 1, 2, 3 ou N dimensions.

Ab initio : calcul effectué à partir des équations fondamentales de la physique.

Adsorption : établissement de liaisons entre les molécules d'un gaz ou d'un liquide avec les atomes de la surface d'un solide.

Algorithme : ensemble de règles opératoires propres à un calcul ou à un traitement informatique.

Algorithme d'inspiration quantique : quantum-inspired Algorithm – algorithme qui émule de façon classique un phénomène quantique.

Big Data : notions et méthodes liées à l'analyse de données massives.

Calcul quantique : l'avantage du calcul quantique est son parallélisme intrinsèque, puisqu'en manipulant des superpositions d'états, on manipule simultanément plusieurs valeurs de bits au sens classique. De plus, l'intrication des qubits permet de réduire le nombre d'opérations logiques accélérant encore les calculs.

Calculateur quantique NISQ : Noisy Intermediate-Scale Quantum – classe actuelle des ordinateurs quantiques, sans correction d'erreurs.

Catalyse : processus impliquant une substance (catalyseur) capable d'accélérer une réaction chimique sans subir elle-même de modifications, sinon temporaires.

Complexité des algorithmes : les principales classes de complexité algorithmique et donc de temps d'exécution sont : constant/logarithmique/linéaire/quadratique/cubique/polynomiale/exponentiel/factorielle.

Deeptech : technologie de rupture.

Défaut ponctuel : défaut localisé en un point d'un réseau cristallin, résultant soit d'un atome manquant, soit d'un atome supplémentaire, soit d'un atome étranger substitué à un des atomes du réseau.

Densité : rapport entre la masse volumique d'un corps et la masse volumique de l'eau.

DFT : théorie de densité fonctionnelle (DFT), qui a montré qu'il suffit théoriquement d'utiliser la densité des électrons, plutôt que leurs amplitudes, pour résoudre les équations de la mécanique quantique.

Dislocation : défaut affectant l'arrangement des atomes dans un solide cristallin.

Dynamique moléculaire : l'évolution temporelle de leur configuration spatiale.

HPC : pour High Performance Computing : simulation numérique haute performance par des méthodes de calcul parallèle.

Intelligence artificielle (IA) : machine/programme qui reproduit des fonctions cognitives (apprentissage, raisonnement, calcul), sensorielles (perception) et/ou motrices (manipulation, navigation, interaction humaine).

Intrication : phénomène qui lie intimement les propriétés de 2 particules, quel que soit la distance qui les sépare. Même A. Einstein en doutait. Le débat fut tranché en 1982, Alain Aspect réalisa à Saclay une expérience démontrant la réalité physique de l'intrication quantique sur des particules de lumière, photons.

Matériau : toute matière utilisée pour la fabrication d'un objet qui a été sélectionnée pour ses propriétés spécifiques et de mise en œuvre en vue d'un usage donné.

Matériau avancé : matériau à haute valeur ajoutée qui permet d'obtenir un avantage marqué du point de vue de la performance, physique ou fonctionnelle, comparativement aux matériaux conventionnels couramment utilisés et auxquels ils se substituent.

Matériaux quantiques : matériaux dont les propriétés inhabituelles (par exemple la supraconductivité) ne peuvent être comprises par des modèles simples ne faisant intervenir qu'un atome ou qu'un électron à la fois.

Mémoire quantique : dispositif permettant de stocker l'état quantique d'un système quantique.

Metal Organic Framework (MOF) : réseaux métallo-organiques/matériaux nanoporeux.

Méthodes d'apprentissage automatique (*Machine Learning*)

Supervisées : classification, régression

Non supervisées : partitionnement, réduction de la dimensionnalité d'un espace de données, réseaux antagonistes génératifs (en anglais, Generative Adversarial Networks GANs).

Microscopie computationnelle : microscopie assistée par ordinateur ou par des dispositifs calculatoires.

Observable : grandeur physique pouvant être observée.

Ordinateur quantique : machine appliquant les principes du calcul quantique permettant de traiter des problèmes très difficiles ou impossibles à appréhender à l'aide d'un ordinateur classique.

Processeur quantique : au cours d'un algorithme (succession d'opérations dites « portes logiques »), le registre du processeur quantique se trouve dans une superposition quantique de tous ses états possibles ($|00\dots0\rangle$, $|10\dots0\rangle$, $|11\dots1\rangle$, $|10\dots1\rangle$), permettant un calcul massivement parallèle.

Réseaux neuronaux (*Neural Networks*): peuvent être utilisés pour l'apprentissage et la classification.

Simulation à n corps : simulation de n objets et de leurs interactions dans le temps. On appelle « problème à n corps » la détermination des trajectoires de n objets dont chacun est en interaction gravitationnelle avec tous les autres. Selon cette dénomination, le problème à deux corps a été complètement résolu par Newton lorsqu'il décrit les ellipses suivies par une comète autour du Soleil en l'absence de toute planète.

Système quantique : objet physique étudié à l'échelle microscopique pour ses propriétés quantiques intéressantes.

Temps de cohérence : temps au bout duquel la disparition des états quantiques superposés est observée au niveau macroscopique. L'idée de base de la décohérence est qu'un système quantique ne doit pas être considéré comme isolé, mais en interaction avec un environnement possédant un grand nombre de degrés de liberté. Ce sont ces interactions qui provoquent la disparition rapide des états superposés.

Quanta : désigne le caractère discontinu de l'énergie à l'échelle des atomes et des particules élémentaires.

Qubit : Bit quantique représentant la brique de base de l'information quantique. Dans un ordinateur classique, l'information est stockée dans un ensemble (registre) de cases mémoires, les bits, dont les valeurs discrètes sont soit 0, soit 1. Un bit quantique a, quant à lui, deux états quantiques $|0\rangle$ et $|1\rangle$, séparés par une différence d'énergie, et peut être à la fois dans ces deux états, dans une proportion variable correspondant à la notion de superposition d'états.

Superposition : principe de la mécanique quantique selon lequel on peut décrire tout état d'un système quantique comme une superposition d'états physiques de base et/ou mathématiquement, sans référence à une incarnation physique spécifique.



ÉLÉMENTS DE BIBLIOGRAPHIE

Pour explorer davantage l'apport de l'IA et des technologies quantiques à l'innovation dans les matériaux, voici quelques lectures recommandées :

'Quantum Simulation of materials on near-term quantum computers', npj Computational Materials, June 2020

'Deep Learning's Diminishing Returns: The cost of improvement is becoming unsustainable', IEEE Spectrum, Sept 2021 <https://spectrum.ieee.org/deep-learning-computational-cost>

'Collaborative Platforms for Innovation in Advanced Materials', OECD Science, Technology & Industry Policy Papers, December 2020 No.95

'Revolutionising Product Design and Performance with Materials Innovation', David L. McDowell, Ch 6 of The Next Production Revolution – Implications for Governments and Business, OECD, Sept. 2017

'La Quantique autrement : Garanti sans équation!' Julien Bobroff, Éd Flammarion, 2020, ISBN 978-2-0815-1886-5.

'High Throughput Experimental Materials Database' doi: 10.7799/1407128.

'Material Selection and Analysis Tool' de la NASA, qui contient de nombreuses bases de données de matériaux : www.maptis.nasa.gov



info@prima.ca | 514 284-0211

PRIMA Québec, le Pôle de recherche et d'innovation en matériaux avancés, anime et soutient l'écosystème des matériaux avancés, un moteur d'innovation et de croissance pour le Québec. Par son accompagnement et le financement offert, il contribue à stimuler la compétitivité des entreprises québécoises en leur permettant de profiter de l'expertise en recherche. En tant que regroupement sectoriel de recherche industrielle (RSRI), PRIMA Québec compte sur le soutien financier du gouvernement du Québec et du secteur privé pour favoriser les relations recherche-industrie.

La liste des membres industriels, académiques et partenaires, est disponible sur le site web de PRIMA Québec.

www.prima.ca