

New Approaches in Materials Science: High-Throughput Methods, Machine Learning, and High-Entropy Materials

Ce séminaire est consacré aux **matériaux à haute entropie**, une nouvelle famille de matériaux qui se distinguent par la combinaison de cinq éléments ou plus en proportions égales, conduisant à des propriétés uniques. Les métaux et les oxydes à haute entropie présentent des caractéristiques exceptionnelles en termes de résistance mécanique, de stabilité thermique et de conductivité électrique, ce qui les rend prometteurs pour une variété d'applications technologiques, notamment dans le domaine de l'hydrogène. Une particularité notable de ces matériaux est l'**effet cocktail**, qui résulte de la complexité chimique élevée et conduit à des propriétés fonctionnelles améliorées ou inédites. Cependant, la sélection des compositions optimales est un défi majeur en raison du nombre immense de combinaisons possibles—on parle de millions, voire de milliards de possibilités. Il est donc indispensable d'adopter des **méthodes à haut débit** pour la synthèse et la caractérisation de ces matériaux. De plus, la **modélisation numérique** et l'**apprentissage automatique** jouent un rôle crucial dans la prédiction des propriétés et l'orientation des expériences, accélérant ainsi la découverte de nouveaux matériaux à haute entropie.

Ce séminaire a été préparé avec le PEPR DIADEME

PROGRAMME

10h00 - 12h45

- ✓ **Guilhem Dezanneau**, Centrale Supélec : *“L'accélération en Science des Matériaux: Application aux matériaux pour cellules d'électrolyse haute température”*
- ✓ **Matthew Suchomel**, ICMCB – Bordeaux : *“Challenges in high-throughput inorganic material prediction and automated analysis of powder X-ray diffraction data”*
- ✓ **Claudia Zlotéa**, ICMPE – Thiais : *“High entropy alloys as versatile platforms for solid-state H₂ storage”*
- ✓ **Emilie Gaudry**, IJL, Université de Lorraine, Complex oxides : *“Structure and properties based on machine learning and Density Functional Theory”*
- ✓ **David Berardan** : ICMMO, Paris- Saclay : *“Cocktail effect and chemical control of functional properties in high-entropy oxide.”*

Déjeuner

14h00-16h30

Table ronde : Comment les approches à haut débit et les techniques de modélisation peuvent-elles être intégrées pour améliorer l'efficacité du développement de nouveaux matériaux, et quels sont les obstacles actuels à cette intégration ?