

AMBASSADE DE FRANCE AUX ETATS-UNIS MISSION POUR LA SCIENCE ET LA TECHNOLOGIE



Benjamin Grenier
Céline Farvacque
sciences-physiques.vi@ambafrance-us.org
Chargés de mission

Washington, le 1^{er} Août 2002

Department of Energy **Nanoscale Science Research Centers**

Résumé:

Le Department of Energy, et sa division Basic Energy Sciences, se sont lancés dans la course aux nanotechnologies, avec trois centres dédiés : les Nanoscale Science Research Centers (NSRCs), à Los Alamos & Sandia Laboratories, à Oak Ridge National Laboratories et au Lawrence Berkeley National Laboratories. La construction d'un quatrième centre à Brookhaven a été finalement décidée en juin 2002, celle du centre d'Argonne est repoussée à une date ultérieure.

Cette note donne une présentation générale de ces cinq « nanocentres », leur organisation, les moyens et infrastructures à leur disposition, et les recherches qui seront effectuées.

SOMMAIRE

INTRODUCTION	3
 CENTER FOR INTEGRATED NANOTECHNOLOGIES, SANDIA & LOS ALAMOS NATIONAL LABORATORIES	
INTRODUCTION	5
PRÉSENTATION.....	6
ORGANISATION.....	7
RECHERCHE ET DÉVELOPPEMENT.....	9
 CENTER FOR NANOPHASE MATERIALS SCIENCES, OAK RIDGE NATIONAL LABORATORIES	
INTRODUCTION	13
PRÉSENTATION.....	14
ORGANISATION.....	15
RECHERCHE ET DÉVELOPPEMENT.....	19
 MOLECULAR FOUNDRY, LAWRENCE BERKELEY NATIONAL LABORATORIES	
INTRODUCTION	22
PRÉSENTATION.....	24
ORGANISATION.....	24
RECHERCHE ET DÉVELOPPEMENT.....	27
 CENTER FOR FUNCTIONAL NANO MATERIALS, BROOKHAVEN NATIONAL LABORATORIES	
INTRODUCTION.....	29
PROJET DU NRSC	30
 CENTER FOR NANOSCALE MATERIALS, ARGONNE NATIONAL LABORATORIES	
INTRODUCTION.....	35
PROJET DU CNM.....	35

INTRODUCTION

Le Department of Energy (DoE, <http://www.energy.gov/>), et sa division Basic Energy Sciences (BES, <http://www.sc.doe.gov/production/bes/bes.html>), se sont lancés dans la course aux nanotechnologies, initiée par la National Nanoscale Initiative (NNI, <http://www.nano.gov/>) du gouvernement Clinton en 1999.

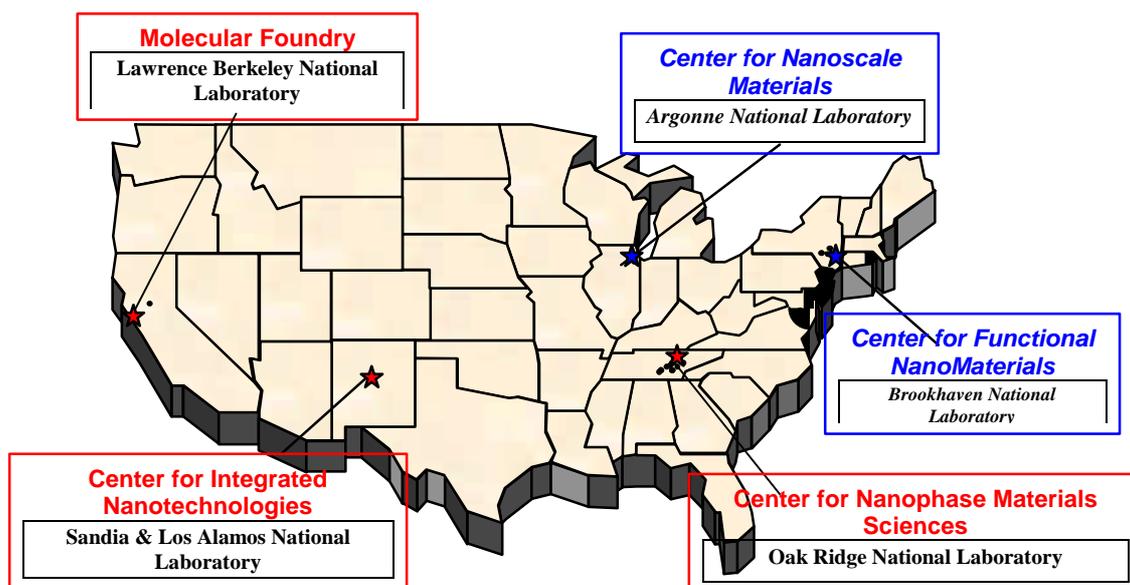
Le comité consultatif du BES (Basic Energy Science Advisory Committee, BESAC, <http://www.sc.doe.gov/production/bes/BESAC/BESAC.htm>) a opté pour le financement de trois centres entièrement consacrés aux nanotechnologies sur les sites de laboratoires fédéraux déjà existant. Le projet initial comportait cinq centres : présentation de Patricia Dehmer lors de la conférence BESAC de février 2001 (<http://www.sc.doe.gov/production/bes/BESAC/PPT02-26-01.htm>). Les sites de Sandia/Los Alamos, Oak Ridge et Lawrence Berkeley ont été élus (<http://www.sc.doe.gov/production/bes/BESAC/PPT08-02-01.htm>), ceux de Brookhaven et d'Argonne avaient été mis en suspens. Le gouvernement finançait à l'époque ces trois projets par une somme de \$3 millions pour FY2002 (*Appropriation*) pour le Project Engineering Design des NSRCs (<http://www.sc.doe.gov/production/bes/BESAC/PPT11-14-01.htm>, transparent N°3), ce financement sera encore renouvelé pendant quelques années.

La construction du centre de Brookhaven vient d'être confirmée, en juin 2002. Celui d'Argonne est repoussé à une date ultérieure.

Ces centres sont, dans l'ordre présenté dans ce rapport :

- Center for Integrated Technologies (CINT), au Nouveau Mexique, avec la collaboration de deux sites : Sandia National Laboratory (SNL, <http://www.sandia.gov/>) & Los Alamos National Laboratory (LANL, <http://www.lanl.gov/>),
- Center for Nanophase Materials Sciences (CNMS), à l'Oak Ridge National Laboratory (ORNL, <http://www.ornl.gov/>),
- Molecular Foundry au Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL, <http://www.lbl.gov/>),
- Center for Functional NanoMaterials (CFNM), à Brookhaven National Laboratory (BNL, <http://www.bnl.gov/>),
- Center for Nanoscale Materials (CNM), à Argonne National Laboratory (ANL, <http://www.anl.gov/>).

La carte ci-dessous montre la répartition géographique de ces nanocentres (en rouge les nanocentres dont la construction a été lancée en février 2001 et en bleu les deux projets en attente). Ces nanocentres compléteront le nombre et la qualité des installations scientifiques mis à la disposition par le DoE/BES (*facilities*), dont on peut voir l'importance dans la présentation de Patricia Dehmer (directeur du BES) lors de la dernière réunion BESAC du 15-16 Novembre 2001 (<http://www.sc.doe.gov/production/bes/BESAC/PPT11-14-01.htm>, transparent N°16).



La volonté du DoE, exprimée par l'intermédiaire de Richard Kelley lors du CINT, est de voir les National Science Research Centers (NSRCs) au cœur des bases et besoins scientifiques pour développer et intégrer les nanomatériaux aux Etats-Unis, avec :

- Le développement des frontières du savoir,
- La création et la gestion de nouveaux équipements,
- Le partage innovant et efficace des connaissances avec des équipes compétentes dans le domaine des nanotechnologies.

Ceci au sein des nanocentres et des différents laboratoires nationaux du DoE, et en collaboration étroite avec les autres centres scientifiques du DoE, les universités et l'industrie.

L'évolution des projets pour la création de cinq NRSCs par le DoE s'est révélée au fil de trois réunions BESAC à Washington, DC :

1- *26-27 Février 2001* : Annonce et présentation des projets de création de cinq NSRCs

(<http://www.sc.doe.gov/production/bes/BESAC/PPT02-26-01.htm>),

2- *2-3 Août 2001* : Choix de trois NSRCs

(<http://www.sc.doe.gov/production/bes/BESAC/PPT08-02-01.htm>),

3- *14-15 Novembre 2001* : Présentation des trois centres choisis : CINT (Sandia/Los Alamos), CNMS (ORNL), et Molecular Foundry (LBNL)

(<http://www.sc.doe.gov/production/bes/BESAC/PPT11-14-01.htm>).

CENTER FOR INTEGRATED NANOTECHNOLOGIES, SANDIA & LOS ALAMOS NATIONAL LABORATORIES

CINT, <http://nano.sandia.gov/NCINT.htm>
<http://www.lanl.gov/cint>

Présentation du CINT lors de la conférence BESAC en Novembre 2001 :
<http://www.sc.doe.gov/production/bes/BESAC/BESACMichalske11-14-01.ppt>

Introduction

Deux laboratoires nationaux du DoE, Sandia (<http://www.sandia.gov/>) et Los Alamos National Laboratories (<http://www.lanl.gov/>), assureront la création, l'organisation et les activités de Recherches & Développement du CINT.

Los Alamos (<http://www.lanl.gov/>)

Créé à la suite du projet Mahattan (arme nucléaire) en 1945, le centre de Los Alamos est opéré par l'Université de Californie pour la National Nuclear Security Administration du DoE. La mission de ce centre est d'assurer la fiabilité et la sécurité des armes atomiques et de l'arsenal nucléaire, et de développer la sécurité nationale en matière d'énergie, d'environnement et de santé.

Le budget annuel est d'environ \$1.5 milliards pour une superficie de 110 km², avec 2 436 bâtiments, 43 équipements scientifiques mis à disposition (*Facilities*), dont entre-autres le Los Alamos Neutron Science Center (LANSCE, http://lansce.lanl.gov/index_ext.htm) et le National High Magnetic Field Lab (NHMFL, <http://www.lanl.gov/orgs/mst/nhmfl/welcome.html>). Plus de 10 000 personnes travaillent sur le site, dont 1800 étudiants (avec environ 275 post-doctorants) originaires de 245 universités (américaines ou étrangères).

Les recherches s'inscrivent dans divers domaines, tels que l'informatique, la radiographie dynamique, les sciences des matériaux, la physique de haute énergie, l'élaboration. Les recherches non-militaires s'orientent vers l'énergie et l'environnement, les matériaux (piles à combustibles), la bio-science, l'ensemble Modélisation / Simulation / Informatique de haute performance, etc. Les nanosciences concernent le contrôle et la sécurité des armes, la détection des agents biologiques, l'espace et beaucoup d'autres sujets puisque le « nano » est à la base de toutes les nanosciences.

Sandia (<http://www.sandia.gov/>)

Créé aussi à la suite du projet Mahattan, le centre de Sandia était géré depuis 1949 par American Telephone & Telegraph Corporation (AT&T, <http://www.att.com/>) pendant 44 ans. Aujourd'hui le centre est géré pour le DoE par la société Lockheed Martin Corporation (<http://www.lockheedmartin.com/>). L'objectif du centre est de fournir le support nécessaire en science et ingénierie pour gérer le stock et le stockage d'armes nucléaires. Aujourd'hui la mission s'étend à d'autres aspects de la sécurité nationale américaine, tels que le frein aux armes nucléaires, chimiques et biologiques, le développement des technologies et des stratégies répondant aux menaces émergentes telles que le terrorisme, et la prévention d'une interruption d'infrastructures critiques telles que la livraison d'énergie et les réseaux financiers. Sandia accroît aussi son effort de collaboration avec l'industrie, les universités et les autres agences gouvernementales pour commercialiser de nouvelles technologies.

Sandia possède aussi de nombreuses *facilities* avec les Component Modeling and Characterization Facility, Virtual Laboratory Testbed, Materials and Process Diagnostics Facility, etc. Environ 7600 employés permanents travaillent sur le site, dont une partie sur le site de Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL, <http://www.llnl.gov/>).

La R&D du centre s'oriente encore plus aujourd'hui vers les équipements pour l'informatique de forte puissance (*supercomputing*) et la mise en commun de l'information. Grâce aux compétences développées pour le nucléaire, les projets d'études se sont développés dans les systèmes microélectroniques et les semi-conducteurs, la robotique, la simulation, les énergies renouvelables, etc. Leurs compétences diverses s'inscrivent aussi dans les nouveaux procédés, les biotechnologies, les sciences de l'information et des calculs, l'électronique, les sciences de l'ingénieur, la science des matériaux et des procédés, la microélectronique et la photonique, la modélisation et la simulation, les nanotechnologies, la science de la puissance pulsée, et la sécurité.

Présentation

La mission du CINT (<http://nano.sandia.gov/NCINT.htm> , présentation de Novembre 2001 à la conférence BESAC : <http://www.sc.doe.gov/production/bes/BESAC/BESACMichalske11-14-01.ppt>) sera d'assurer :

- La fabrication et la caractérisation à l'échelle nanométrique,
- La compréhension et le contrôle des matériaux à l'échelle nanométrique, et
- L'éducation et la formation en « nanoscience ».

Ce Centre a organisé son premier colloque du 27 au 29 Septembre 2001 à Albuquerque, Nouveau Mexique (USA) (<http://nano.sandia.gov/cint.pdf>) :

- Introduction aux nanotechnologies : point de vue gouvernemental (DoE), universitaire, et industriel,
- Concept du futur centre,
- Thèmes d'études et Equipements nécessaires,
- Collaborations.

Tous les organismes publics ou privés ont été invités : l'affluence était de 200 participants originaires de 24 états et représentant 48 universités, 14 compagnies, et 12 laboratoires gouvernementaux ou fédéraux. On peut aussi noter une forte participation des chercheurs des deux laboratoires gouvernementaux du DoE qui vont accueillir et gérer le CINT : Sandia et Los Alamos. La forte participation du monde scientifique et technologique américain, se comprend facilement avec l'ouverture inhabituelle de ces deux laboratoires nationaux vers le monde extérieur.

Le programme de cette manifestation était le suivant :

- Présentation du contexte « nanotechnologies » : points de vue universitaire et industriel, Michael Roukes (Caltech, <http://www.cmp.caltech.edu/~roukes/roukes.html>), Ray Tsui (Motorola, <http://www.motorola.com/home/>) et Paul Barbara (UT Austin, <http://www.cm.utexas.edu/faculty/Barbara.html>)
=> questions-clé en nanoscience : intégration dimensionnelle et multidisciplinaire, transfert de technologies, développement d'outils de caractérisation et d'observation adéquats.
- Présentation de Richard Kelley, représentant du Basic Energy Science au DoE : rôle du DoE dans la National Nanoscale Initiative (NNI, www.nano.gov) avec les NRSCs.
- Présentation des thèmes de recherches, de l'organisation et des futures installations du CINT.
- Présentation des rôles de l'industrie, des laboratoires nationaux, et des universités dans la « National Science Enterprise » (Venkey Narayanamurti, Harvard).
- Présentations détaillées des quatre grands thèmes de recherches du CINT :
 - o nanophotonique et nanoélectronique,
 - o nano/bio/micro interfaces,
 - o nanomécanique,
 - o matériaux complexes fonctionnels.
- Discussion autour de chaque grand thème : présentations, suggestions, et critiques autour des sujets suivants :
 - o Développement des moyens efficaces de communication et d'échanges au sein de la communauté nano-scientifique,
 - o Clarification des processus définis pour l'accès au CINT : chercheurs et équipements,
 - o Définition des objectifs et des challenges scientifiques critiques grâce à des colloques spécifiques.
- Conclusion (bilan des discussions et remerciements).

Les deux directeurs T.Michalske (SNL) et D.Parkin (LANL) ont été agréablement surpris du succès de leur séminaire. Le CINT, centre élu par le DoE Basic Energy Sciences, devrait pouvoir réaliser les objectifs fixés, si les fonds promis suivent. On peut aussi remarquer que c'est la première fois que ces deux laboratoires nationaux, connus pour leur discrétion, ouvrent leur porte aux universités et industries américaines (et internationales ?). Le monde scientifique américain semble avoir répondu présent et vouloir saisir l'occasion qui leur est offerte pour entamer des collaborations et développer leurs propres projets. On peut noter qu'ils restent assez inquiets par rapport à l'accès au CINT et aux divers équipements nouveaux et anciens des deux sites (SNL et LANL). Ils attendent avec impatience l'éclaircissement du fonctionnement et la mise en place de ce nanocentre.

Organisation

Le CINT profitera de la proximité des centres du DoE de Sandia et Los Alamos, donc de la présence d'une compétence scientifique certaine ainsi que la présence d'équipements de pointe : NHMFL, High Performance Computing, μ -fabrication, Neutron Source, etc. Les spécificités des laboratoires Sandia et Los Alamos seront respectivement microfabrication & nanomatériaux, et biosciences & nanomatériaux. L'équipe de direction et le site Internet du CINT étant déjà en place et en cours d'évolution, l'agenda assure un début des activités concrètes de ce nanocentre fin 2002, et celui des constructions des divers bâtiments à partir de début 2003.

Objectifs et Challenges :

Avec comme mots clé Découverte, Intégration, Formation, et Performance, le rôle du CINT est de :

- Développer les principes scientifiques qui dirigent les performances et l'intégration des matériaux à l'échelle nanométrique,
- Etre un centre de formation pour la nouvelle génération de chercheurs en nanoscience et en nanotechnologie.

Le passage de la découverte scientifique à l'intégration des nanostructures dans le monde micro/macro (Théorie et Expérimentation, Synthèse et Procédé, Performance, et Intégration) est un défi majeur du CINT pour :

- Le développement et la compréhension des principes qui gouvernent l'assemblage et qui mènent aux fonctionnalités désirées,
- La compréhension de la physique et de la chimie des comportements coopératifs et complexes à l'échelle nanométrique (propriétés et contrôle),
- La compréhension et le contrôle des interfaces (transport et transfert, interfaces entre entités biologiques ou non),
- Le développement d'outils pour caractériser les propriétés et la structure des matériaux nanométriques (précision et interconnexions).

Infrastructures :

Le CINT verra la construction de nouveaux bâtiments, qui devrait débuter dès 2003. Le coût de cet investissement a été confirmé en août 2002 par le DOE, et atteindra une valeur de \$75 millions, partagée entre Albuquerque (\$45 à \$50) et Los Alamos (\$15 à \$20). Cela comprendrait un laboratoire de Fabrication (dépôt de couches minces ; photolithographie ; gravure au plasma, humide et au faisceau d'électrons), un laboratoire technique pour les procédés et l'environnement, plus des outils de caractérisation, etc. Le bâtiment principal du CINT jouxtera le site de Sandia, à Albuquerque, NM, en étant à l'extérieur pour en faciliter l'accès.

Les futures installations et équipements pour la synthèse, la caractérisation, et l'intégration de nanomatériaux seront répartis sur trois sites :

? un bâtiment principal du CINT à Sandia comportera :

- Laboratoire d'intégration (chambre blanche de classe 1000) : faisceaux électroniques et ioniques, photolithographie, déposition métallique, gravure à sec ou humide
- Laboratoire de caractérisation : FE-SEM, Eniv.-SEM, TEM, AFM, STM, X-ray, Auger, XPS, SIMS, IR, Ellipsometer, UV-vis, iCP, PL, Confocal, Fluorescence
- Laboratoire de synthèse : chimie humide, culture de cellule, PVD, PLD, MBE, chimie organique et inorganique de synthèse
- Laboratoire de théorie
- Aire d'interaction : pièces de conférences et de cours, vidéo, etc.

? Sandia NL : « Nanomatériaux et Microfabrication »

- microfabrication : CMOS, MEMS, NEMS, MOCVD
- nanomatériaux : AT-STM, IFM, NSOM, LEEM, TEM, synthèse de nanocorps
- théorie et informatique
- espace visiteur, équipements de partage.

? Los Alamos NL : « Nanomatériaux et Biosciences »

- biosciences : culture de cellules, ingénierie génétique, écrans bactériens, biologie moléculaire, imagerie et caractérisation,

- nanomatériaux : MRFM, fast NSOM & STM, TEM, croissance cristalline, LANSCE, HMFL, Teraflon Computing Lab (High Performance Computing)
- théorie et informatique
- espace visiteur, équipements de partage.

L'accès à toutes ces installations devrait être à très bas coût pour les universités, et être facilité pour les laboratoires nationaux et fédéraux et les industriels, ainsi qu'à la communauté scientifique internationale (*Gateways*) :

- accès facilité au CINT,
- accès privilégié aux autres *facilities* des deux centres DoE.

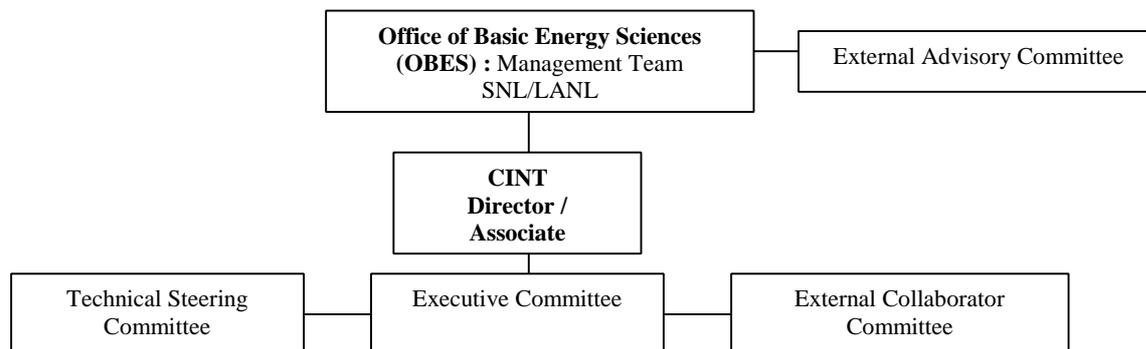
Le personnel permanent au CINT devrait comprendre, en plus des personnels impliqués de Los Alamos et Sandia, et les opérateurs du CINT, 50 à 70 chercheurs, 40 post-doctorants, 40 étudiants, plus une centaine de chercheurs invités, avec l'implication d'au moins 70 instituts (48 universités, 14 entreprises, et 12 laboratoires de recherches).

Contacts :

Directeur du CINT : **Terry Michalske**
(Sandia National Laboratories),
Mail : tamicha@sandia.gov
Tél. : (505)844-5829
Fax : (505)844-5470

Directeur Associé : **Don Parkin**,
(Los Alamos National Laboratories).
Mail : dmp@lanl.gov
Tél. : (505) 665 1131
Fax : (505) 665 4584

Structure :



Structure de l'organisation du CINT

L'External Advisory Committee sera représenté par des représentants industriels, académiques, des différents NSRCs du DoE (centres et direction du DoE), et de la NSF.

L'Executive Committee sera représenté par le directeur et le directeur associé du CINT, un responsable de programme BES pour chaque laboratoire SNL et LANL, un responsable communication, et un responsable des opérations et des constructions du CINT.

L'External Collaborator Committee sera représenté par un représentant stratégique de chaque laboratoire SNL et LANL, et d'un représentant du Basic Energy Sciences (BES).

Le Technical Steering Committee sera composé d'un responsable de programme BES pour chaque laboratoire SNL et LANL, des responsables de chaque grand thème de recherches (4) du CINT et de membres extérieurs élus pour un certain mandat.

Collaborations et interfaces :

Avec la création du CINT, les collaborations seront encouragées :

- Universités,
- Laboratoires fédéraux et nationaux (autres NRSCs, plus Air Force Research Lab (<http://www.afrl.af.mil/>), U.S. Army Research Laboratory (<http://www.arl.army.mil/main/Main/default.cfm>), National Institute of Standards Technologies (<http://www.nist.gov/>), etc.),
- Industries : industries locales, grandes entreprises (Motorola, etc.), PME-PMI (Emcore, Zia Laser, Sandia Systems, Grating, etc.)
- Communauté scientifique internationale.

Les propositions de collaboration et de projets de recherches seront étudiées et décidées conjointement par des scientifiques du CINT et leurs collaborateurs, avec un processus de révision effectué par un comité technique d'examen. Ce système assurera la qualité scientifique des thèmes d'études et de leur programme, ainsi que le mécanisme adéquate pour la proposition et l'acquisition des biens propres (problème du partage et la propriété des brevets : *separate proprietary proposal mechanism*). Les relations et la communication sont une priorité et seront assurées par :

- Des colloques, des séminaires, et des formations spécifiques fréquentes,
- Des informations sous forme de lettre périodique relatant les évolutions et faits marquants de l'actualité du CINT,
- Un site Internet CINT très interactif (actuellement : <http://nano.sandia.gov/NCINT.htm>).

Recherche et Développement

Les efforts de recherches sont regroupés à travers 4 thèmes, dans lesquels les liens et les interactions devront être permanents, notamment à travers les différentes équipes et installations (à construire ou déjà existantes).

Lors du colloque CINT, à chaque thème ont été débattues les questions suivantes :

1. les questions scientifiques clé pour les nanosciences,
2. les installations/équipements/moyens d'expertise nécessaires,
3. les opportunités et l'amélioration des partenariats Universités / Industrie / Laboratoires fédéraux et nationaux.

Les résultats de toutes ces discussions ont été résumés et sont retranscrits ci-dessous :

Nanophotonique et Nanoélectronique :

Responsables :

- Sandia NL : Jerry A. Simmons, jasimmon@sandia.gov
- Los Alamos NL: Victor Klimov, klimov@lanl.gov

Contacts :

- Sandia NL : Mike Sinclair, Mike Lilly, Eric Jones, Dave Follstaedt.
- Los Alamos NL: Toni Taylor, Darryl Smith, Stuart Trugman, Chris Hammel.

Le but de ce thème est d'explorer les nouvelles frontières en photonique et électronique (nouveaux matériaux, outils et systèmes) avec :

- Le contrôle des propriétés électroniques et optiques, en relation avec les effets d'échelle quantique, la nanomécanique, la théorie et la caractérisation,
- Le contrôle des interactions électroniques,
- Le contrôle des interactions photoniques,
- Les puits quantiques des nanocristallins,
- Les nouvelles orientations avec :
 - o les nouveaux systèmes photoniques : association de puits quantiques et de structures photoniques,
 - o les interactions électroniques dans des systèmes hybrides inorganiques-organiques,

- les interactions spins et nanostructures magnétiques (transitions super-paramagnétiques dans les nanoparticules),
- les nouveaux outils de caractérisation à l'échelle nanométrique (Magnetic Resonance Force Microscopy, time-resolved NSOM, ultra-fast STM).

Des études sont actuellement portées aux Los Alamos et Sandia NL sur les sujets suivants :

- Tunable electronic spectra in Q-dot solids,
- Correlated states in coupled Q-wires,
- Tunable photon states in photonic structures,
- Interplay between tunable electronic and photonic spectra,
- Organic/inorganic hybrid structures,
- Bio-inspired photonic structures.

Les réponses aux questions du CINT ont été (bien entendu, ce sont des suggestions) :

1. Sujets clé : les nanostructures (transport d'énergie et de charge, fréquence, nano-spintronique), les semi-conducteurs, la reproductibilité, les procédés d'intégration.
2. Infrastructure : la croissance des semi-conducteurs (flexibilité et pureté), la lithographie de haute qualité, les équipements utilisés à basse température et sous fort champ magnétique.
3. Collaboration : les problèmes de la propriété intellectuelle, l'intégration théorie et modélisation, les perspectives, le site Internet, le recrutement, les programmes spécifiques, l'accueil des chercheurs invités, la participation de la communauté scientifique globale.

Matériaux fonctionnels complexes:

Responsables :

- Sandia NL : Duane Dimos, dbdimos@sandia.gov
- Los Alamos NL : Art Ramirez, aramirez@lanl.gov

Contacts :

- Sandia NL : Jeff Brinker, Frank Van Swol, Jim Martin.
- Los Alamos NL: Victor Klimov, Sasha Balatsky.

Le but de ce thème est d'intégrer les multiples matériaux et structures du nano au macro pour comprendre les interactions complexes et/ou habituelles, et de développer les relations comportements - structures - propriétés. Ce thème comportera trois sujets :

1. Synthèse (élaboration de nano-éléments et mésophases) & Intégration (association approches « top-down » et « bottom-up ») avec l'étude des matériaux et des procédés,
2. Théorie & Simulation (conception de matériaux, nanofabrication, performances des matériaux),
3. Caractérisation,

avec le développement des synergies et des propriétés émergentes.

De nombreux projets sont prévus :

- matériaux nanostructurés, conçus et synthétisés à l'échelle nanométrique (nano-cellules),
- molécules et solides à puits quantiques (nouveaux types de solides artificiels),
- auto-assemblage de matériaux mésophasés,
- intégration des nanomatériaux : développement de nouvelles fonctions, compréhension et exploitation des effets de surface, des contraintes dimensionnelles, et des phénomènes communs,
- auto-assemblage induit par évaporation qui rend l'intégration nano / micro / macro : facile et efficace.

Des recherches sont actuellement portées aux LA et Sandia NL sur :

- Many materials with unique functionality have complex crystal structures,
- Novel precursor chemistries enable complex materials synthesis, Tuning the Quantum Dot-Molecule Interface,
- New electronic materials enable new functionality.

Les réponses aux questions du CINT ont été (bien entendu, ce sont des suggestions) :

1. Sujets clé : la synthèse (auto-assemblage, modèle, moyens, matériaux avec des propriétés nanométriques), les structures, la dynamique, les défauts, les comportements révolutionnaires, et l'intégration.

2. Infrastructure : les outils de caractérisation adéquates, les chambres blanches, l'accès à distance aux bibliothèques et l'accès aux autres équipements (accès à distance notamment pour les super-calculs) des deux laboratoires.

3. Collaboration : l'hébergement, les séminaires spécifiques, les écoles d'été, le site Internet interactif, les moyens pour démarrer des projets avec des chercheurs du SNL ou du LANL n'appartenant pas au CINT.

Nano/bio/micro interfaces :

Responsables :

- Sandia NL : Bruce Bunker, bcbunke@sandia.gov
- Los Alamos NL : Andy Shreve, shreve@lanl.gov

Contacts :

- Sandia NL : George Bachand, Darryl Sasaki, Paul Gourley, Jun Liu.
- Los Alamos NL: Atul Patikh, Richard Keller, Peter Goodwin, Greg Smith.

Les objectifs sont :

- Explorer les interfaces physiques entre les systèmes biomoléculaires et les nanomatériaux synthétiques,
- Explorer les interfaces à échelle de mesure multiple (systèmes et applications : assemblage fonctionnel),
- Explorer les interfaces conceptualisées (contrôle et compréhension des interfaces de biosenseurs optiques).

Les effets CINT attendus sont :

- Des équipes pluri-disciplinaires et très interactives,
- Un accès pratique aux différentes installations,
- Des collaborations, comme guide pour le développement de nouveaux outils.

Les challenges scientifiques sont :

- Intégration d'assemblages biomoléculaires fonctionnels dans des matériaux complexes, avec interactivité entre les 4 thèmes de recherches CINT,
- Lien nano – micro,
- Contrôle et optimisation des réseaux de transport prenant comme modèle la biologie,
- Développement de matériaux basés sur des caractéristiques de systèmes biologiques avec le contrôle de nano- bio- micro interfaces.

Des recherches sont actuellement portées aux Los Alamos et Sandia NL sur les biomatériaux, la caractérisation, la bioscience, et la théorie & la modélisation :

- Motor proteins (molecular biology, genetic, engineering), Biomimetic interfaces (complexation chemistry, molecular modeling, self-assembly),
- Fiber guides and activation systems (solid state physics, microfabrication, nanomechanics),
- Microfluidics (fluid mechanics, micromechanics, biochemistry).

Les réponses aux questions du CINT ont été (bien entendu, ce sont des suggestions):

1. Sujets clé : les matériaux élaborés au nanomètre pour leur procurer des fonctions propres, le développement de nouveaux matériaux pour de nouvelles approches pour les études en biologie (auto-organisation).
2. Infrastructures : les nouveaux outils d'expérimentation et de caractérisation, les moyens d'interactions avec les autres groupes.
3. Collaboration : les séminaires spécifiques (groupes de travail), la formation.

Nanomécanique :

Responsables:

- Sandia NL : Charles Barbour, jcbarbo@sandia.gov
- Los Alamos NL : Mike Nastasi, nasty@lanl.gov

Contact:

- Sandia NL : Jack Houston, Sam Myers, Liz Holm, Jerry Floro.
- Los Alamos NL: Mike Nastasi, Amit Misra, Richard Hoagland, Brad Holian.

Le but de ce thème sera la mécanique à l'échelle nanométrique et le transfert d'énergie dans les systèmes du nano au micro (systèmes intégrés), avec la détermination des mécanismes de déformation, de la stabilité des matériaux, et des limites de la mécanique. Les domaines concernés s'inscrivent dans la nanomécanique intégrée avec des bio-fonctions, la physique de déformation à l'échelle nanométrique, le stockage et la dissipation de l'énergie à l'échelle nanométrique.

Les nouveaux outils de développement nécessaires seraient :

- La microscopie à force capillaire pour séparer les origines physiques et chimiques des frottements,
- Les essais de traction en utilisant des nano-indenteurs pour l'analyse des propriétés de matériaux nanostructurés,
- L'analyse des propriétés et des liens nano - micro,
- Autres : nano-indenteurs, SPM-IFM, AFM, TEM avec mesures mécaniques in situ, salles d'essai de traction nanométrique et de rupture nanométrique, nanomachines, etc., avec des installations anti-vibrations.

Des recherches sont actuellement portés aux Los Alamos et Sandia NL sur :

- Future Nano-Machines: Test Materials & Perform Work,
- Science: New Deformation Mechanisms for High Interface/ Volume Ratio, Tool Development: Interfacial Force Microscope.

Les réponses aux questions du CINT ont été (bien entendu, ce sont des suggestions) :

1. Sujets clé : le mécanisme de déformation, le comportement mécanique des matériaux à l'échelle nanométrique face aux dislocations, le contrôle des durées de vie, les propriétés mécaniques locales, l'ensemble théorie/modélisation, la mécanique des fluides au nanomètre.
2. Infrastructures : le développement des outils de caractérisation, de théorie, de modélisation, de synthèse et de la fabrication ; l'amélioration des analyses en direct, la construction d'espaces rencontres.
3. Collaboration : la formation de groupes de travail, l'organisation de conférences et de colloques, l'établissement d'une formation continue, le développement d'un site Internet spécifique.

**CENTER FOR NANOPHASE MATERIALS SCIENCES,
OAK RIDGE NATIONAL LABORATORIES**

Présentation du CNMS lors de la conférence BESAC en Novembre 2001 :

<http://www.sc.doe.gov/production/bes/BESAC/BESACLowndes11-14-01.ppt> (Doug Lowndes)

<http://www.sc.doe.gov/production/bes/BESAC/BESACPlummer11-14-01.ppt> (Ward Plummer)

<http://www.sc.doe.gov/production/bes/BESAC/BESACCummings11-14-01.ppt> (Peter Cummings)

et lors du workshop en juin 2002 http://www.ssd.ornl.gov/CNMS/workshops/workshop_schedule.html

Introduction

Oak Ridge National Laboratory (<http://www.ornl.gov/>)

L'Oak Ridge National Laboratory (ORNL), qui va accueillir le CNMS, est situé à Oak Ridge dans le Tennessee. Il est géré par l'Université du Tennessee à Battelle TN (<http://www.ut-battelle.org/>) pour le DoE. Il s'agit d'un laboratoire de science et technologie multi-programmes avec des recherches fondamentales et appliquées dans les thématiques suivantes : thèmes scientifiques clé, développement d'énergie propre et abondante, dépollution et protection de l'environnement, contribution à la sécurité nationale.

Le centre, avec comme nom d'origine Clinton Laboratories, a été établi en 1943 dans le cadre du projet Manhattan (arme nucléaire). Le laboratoire a ensuite évolué vers des études sur les solutions en ressources énergétiques : énergie et environnement. Il consacre ses efforts au développement de nouveaux matériaux, sources, et technologies pour l'énergie, et aux progrès en biologie, chimie, informatique, ingénierie, environnement, physique et sciences humaines :

- Mission DoE : sciences neutroniques, gestion du carbone, informatique de haute puissance, systèmes biologiques complexes, sciences des matériaux.

- Compétences DoE : chimie analytique et séparative et chimie générale, sciences de l'environnement, science et technologie de la fusion, science et technologie de l'instrumentation, physique et astrophysique nucléaire avec l'utilisation de faisceaux radioactifs, technologies à haut rendement énergétique, énergie biomasse, énergie fossile, nucléaire, analyses des cycles de vie et évaluation des risques pour l'environnement et la santé.

Les principaux équipements scientifiques (*Facilities*) sont :

- Spallation Neutron Source, , <http://www.sns.gov/aboutsns/aboutsns.htm>
- High Flux Isotope Reactor, <http://www.ornl.gov/hfir/hfirhome.html>
- Holifield Radioactive Ion Beam Facility, <http://www.phy.ornl.gov/hribf/hribf.html/>
- High Temperature Materials Laboratory, <http://www.ms.ornl.gov/htmlhome/default.htm>
- Oak Ridge National Environmental Research Park, <http://www.esd.ornl.gov/facilities/nerp/>
- Surface Modification and characterization Research Center, <http://smac.ssd.ornl.gov/>
- Center for Computational Sciences, Mouse Genetics Research Facility, Buildings Technology Center, Radiochemical Engineering Development Center; Plus d'autres équipements mis à disposition de la communauté scientifique: http://www.ornl.gov/tech_transfer/access.htm.

Le budget du centre est de \$870 millions, dont 80% est consacré pour le DoE et 20% pour d'autres partenaires. La superficie du site s'étend sur 150 km². 3800 personnes sont employés à l'ORNL, dont 1500 scientifiques et ingénieurs. 3000 chercheurs invités (dont un quart issus de l'industrie) sont accueillis annuellement dans le centre, ainsi que plus de 30000 visiteurs et plus de 10000 étudiants (second cycle : *precollege students*)

Présentation

Par le biais de Oak Ridge Associated Universities (subventions / collaborations ; <http://www.oraui.org/>), ce laboratoire du DoE montre son intérêt pour de nombreuses et solides relations universitaires et industrielles, en plus de son étroite collaboration avec les autres laboratoires nationaux du DoE. Dans ce contexte, l'ORNL, envisage la création de son NSRC : Center for Nanophase Materials Sciences (CNMS, <http://www.sc.doe.gov/production/bes/BESAC/BESACLowndes08-02-01.ppt>).

Le CNMS aura pour but des recherches sur la synthèse, la fabrication, la caractérisation, et la compréhension des structures, matériaux, et phénomènes à l'échelle nanométrique. Ce nanocentre pourra s'appuyer sur des équipements de haute performance déjà existant à l'ORNL, dont entre-autres le High Flux Isotope Reactor (HFIR, <http://www.ornl.gov/hfir/hfirhome.html>) et le Spallation Neutron Source (SNS, http://www.sns.gov/sns_home.htm) pour des études fondamentales sur la structure et la dynamique des nanomatériaux. Il espère aussi la création d'un laboratoire de recherche sur la nanofabrication, un institut de la théorie des nanomatériaux, et l'extension des instruments de caractérisation.

Les compétences de l'ORNL s'inscrivent autour de 4 sujets :

1. la science neutronique,
2. les procédés d'élaboration,
3. l'ensemble Théorie / Modélisation / Simulation,
4. l'imagerie et la manipulation à l'échelle nanométrique.

Le CNMS permettra d'accélérer les découvertes dans les nanosciences (matériaux et phénomènes nanométriques, auto-organisation à l'échelle nanométrique), grâce au rassemblement de ressources de pointe, à la création de synergies nécessaires, à l'intégration de compétences uniques de l'ORNL, et aux diverses collaborations (laboratoires gouvernementaux, universités, et industries).

A l'image du CINT (confère chapitre précédent), un séminaire de travail a été organisé les 24-25-26 Octobre 2001 à Oak Ridge, Tennessee (<http://www.ms.ornl.gov/nanoworkshop/nanointro.htm>). Le but de ce colloque était de :

- Rassembler la communauté scientifique régionale et nationale,
- Déterminer les projets/sujets de recherches et les équipements nécessaires adéquates,
- Développer des contacts et des collaborations entre compétences (chercheurs et laboratoires) sur des sujets précis,
- Déterminer le fonctionnement du CNMS et les infrastructures nécessaires,
- Discuter l'accès à toutes les installations déjà existantes à l'ORNL et prochainement mises en place au sein du CNMS,
- Etablir les activités et les relations entre nanocentres : NSRCs du DoE, laboratoires fédéraux, nationaux, universitaires, et industriels.

Le programme de la réunion était le suivant :

- Introduction : Patricia Dehmer (Directeur DoE/BESAC), Bill Madia (Directeur de l'ORNL), et Douglas Lowndes (Directeur du CNMS).
- Session plénière, à propos des matériaux nanophasés :
 - o perspectives universitaires : Tom Russel, University of Massachusetts (MRSEC, <http://www.pse.umass.edu/mrsec/overview.html>) ; Zhong Wang, Georgia Tech (Center for Nanoscience and Nanotechnology, <http://www.mse.gatech.edu/people/faculty/wang/wang.html>)
 - o perspectives industrielles : Thomas Theis, IBM Watson Research Center (<http://www.watson.ibm.com/>).
- Sessions de discussion autour de sujets nano et des compétences propres à l'ORNL
 - o Matériaux mous : nanophases organiques, hybrides, et interfaciales
 - o Systèmes de matériaux complexes nanophasés
 - o Nanofabrication research Laboratory
 - o Nanomaterials Theory Institute
 - o Plus de compétences déjà existantes (science neutronique) et aspects logistiques et relationnels (collaborations et interactions).

La forte publicité de cette manifestation s'est vu récompensée avec la participation de 278 personnes, représentant 48 universités, 10 laboratoires nationaux, et 10 entreprises.

Organisation

Objectifs et Challenges :

Le CNMS sera un centre de recherches pour les sciences nanométriques multidisciplinaires, avec de fortes collaborations, et au sein d'une communauté universitaire.

Les challenges du « nano » sont importants dans les disciplines académiques traditionnelles (physique, chimie, biologie, modélisation et simulation, ingénierie), la science des matériaux en général (outils, compétences et besoin), et les questions de dimensionnalité (changement d'échelle, miniaturisation).

Le CNMS souhaite donc répondre aux attentes du BES, avec la création des NSRCs :

- Focalisation de la recherche sur d'importants défis pour comprendre les matériaux et les phénomènes nanométriques,
- Rassemblement des ressources (chercheurs, équipements, et collaborations) et création de synergies qui permettront de développer rapidement les connaissances des matériaux et des phénomènes nanométriques,
- Identification des voies d'intégration de phénomènes et de propriétés nanométriques uniques avec les échelles micro et nano,
- Création d'un environnement pour la formation scientifique multidisciplinaire.

Les objectifs du CNMS sont donc :

- Etre leader dans l'utilisation du balayage neutronique pour étudier les phénomènes nanométriques,
- Etre leader dans la synthèse dirigée par la science (*science-driven synthesis*) via l'ensemble Théorie / Modélisation / Simulation de nouveaux matériaux,
- Avec le Nanomaterials Theory Institute, devenir leader pour la conception de nouveaux matériaux fonctionnels et pour leurs moyens d'élaboration,
- Avec le Nanofabrication Research Laboratory, comprendre et orienter l'auto-assemblage, intégrer les fonctions de matériaux durs et mous,
- Etre le centre de recherches Nanoscale Science, Engineering & Technology (NSET, <http://www.ornl.gov/nset/intro.htm>) multidisciplinaire incontournable du Sud-Est des Etats-Unis.

L'ORNL possède déjà divers équipements d'analyse de pointe reconnus pour les nanosciences. Avec \$12 millions de l'initiative LDRD de la NSET investis pour les années 2000 à 2003, les objectifs de l'ORNL sont :

- Etre le centre leader pour la science neutronique,
- Etre un centre d'excellence pour la compréhension des systèmes biologiques complexes,
- Développer les outils de simulation et d'informatique de haute performance (échelle Tera),
- Maintenir une position leader dans les sciences chimiques, et les sciences et technologies pour les nouveaux matériaux,
- Etendre les capacités de la NSET en développant les outils de caractérisation et les moyens de synthèse.

Infrastructures :

Les bâtiments du CNMS seront à proximité du Spallation Neutron Source (SNS, <http://www.sns.gov/aboutsns/aboutsns.htm>) et le Joint Institute for Neutron Sciences (JINS, <http://www.sns.gov/jins/jins.htm>), au sein d'un site nouvellement appelé « nouveau campus » pour insister sur la notion de communauté scientifique.

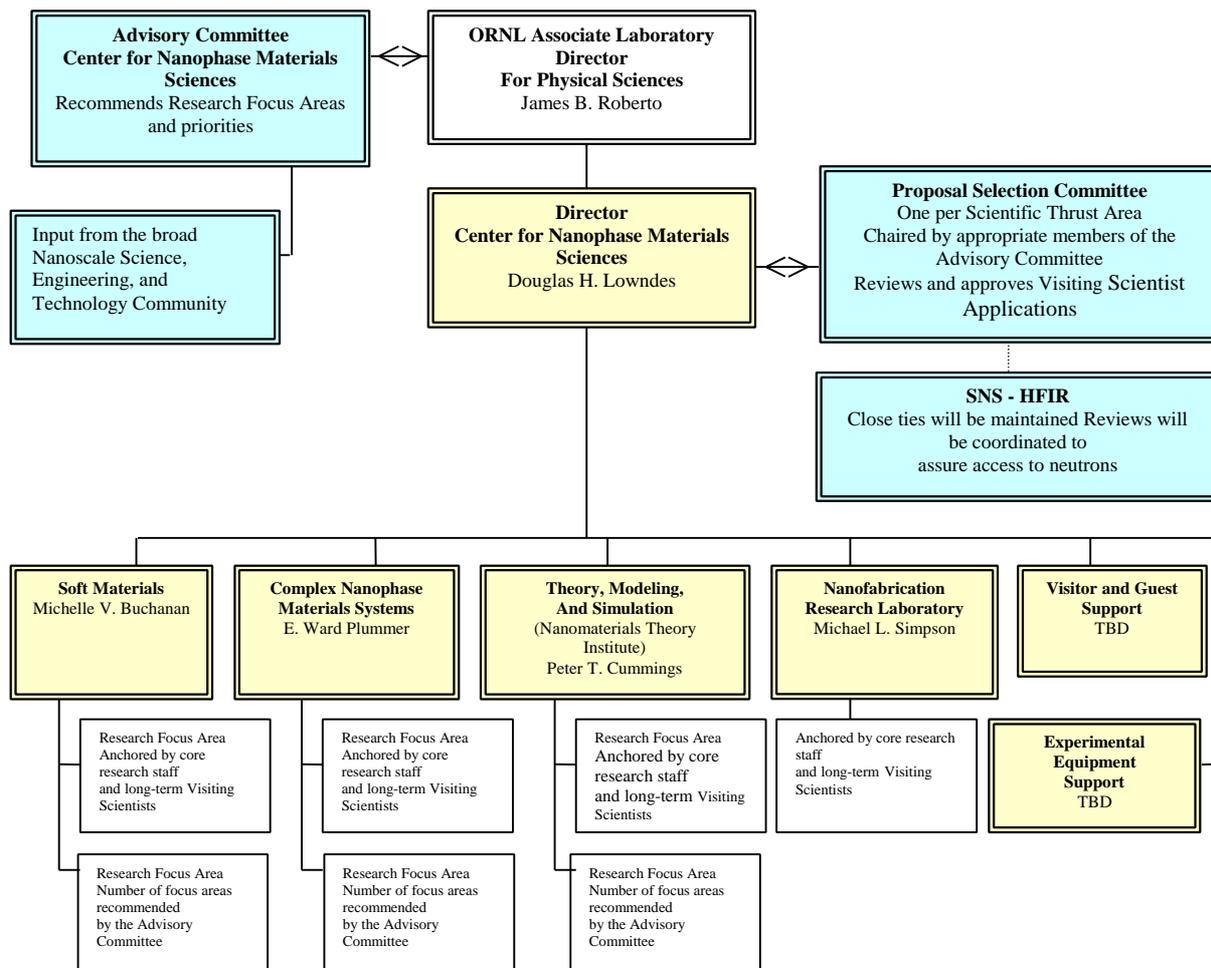
Le CNMS comptera un bâtiment d'une superficie de 800 m² sur quatre niveaux, ainsi qu'une installation pour le Nanofabrication Research Lab (NRL). Ces installations concernent des laboratoires de synthèse et de caractérisation des matériaux « secs et humides », un espace visiteurs, le Nanomaterials Institute Theory Institute (installations pour les super-calculs du Center for Computational Sciences (CCS, <http://www.ccs.ornl.gov/>)), le Nanofabrication Research Laboratory (chambres blanches et à environnements contrôlés, microscopie électronique, manipulation à l'échelle nanométrique (lithographie/gravure électronique), outils pour la manipulation et l'intégration de matériaux durs et mous, sondes de balayage à haute résolution).

Le début des constructions devrait avoir lieu mi-2003, et les installations fin 2004 : le CNMS devrait être totalement opérationnel fin 2005. Le CNMS compte aussi sur une aide externe pour développer ses études avec un financement annuel de l'Etat du Tennessee à hauteur de \$8 millions, une collaboration des compétences

de l'Université du Tennessee, et l'appui de l'Oak Ridge Associated Universities (organisation de réunions, développement des collaborations et des interactions, formation).

L'accès pour les visiteurs sera similaire à celui déjà mis en place actuellement avec les demandes examinées par les comités consultatifs. Une dizaine de sujets de recherches multidisciplinaires accompagneront le projet. Avec un recrutement flexible et multi-disciplinaire, et avec une présence universitaire dans les équipes de direction et du personnel, le CNMS devrait donc s'ouvrir sur des collaborations principalement universitaires, mais aussi industrielles et avec les autres laboratoires nationaux : *pool* scientifique. 35 étudiants, 35 chercheurs invités, et 18 post-doctorants devraient travailler au CNMS avec le personnel issu de l'ORNL.

Organisation du CNMS :



L'Advisory Committee comprendra 9 membres (6 extérieurs, dont un industriel, et 3 locaux) des experts dans les trois thèmes scientifiques et la recherche en nanofabrication. Il aura pour but de diriger les orientations et les priorités des recherches, de revoir les comités pour faire évoluer les activités de recherches et de formation, et pourra recommander de manière discontinue de nouveaux thèmes de recherches si besoin. Les propositions de travaux au CNMS seront étudiés par des comités spécifiques à chaque thème.

Contacts (obtenus par Benjamin Grenier lors de la visite effectuée en septembre 2001 à la conférence Georgia Tech (Nano)) :

Douglas Lowndes	Directeur du CNMS
Corporate Fellow & Group Leader for Thin Film & Nanostructured Materials Physics, ORNL, Professeur à l'Université du Tennessee	Mail : lowndesdh@ornl.org Tél. : (865) 574-6306 Fax : 865-576-3676

Michael Hu	Chercheur
Separations & Materials Processing Research, Chemical Technology Division, ORNL	Mail : huml@ornl.org Tél. : (865) 574-8782 Fax : 865-241-4829
Michelle Buchanan	CNMS, responsable du thème : Matériaux mous
Directeur de la Chemical Sciences Division, ORNL	Mail : buchananmv@ornl.gov Tél. : 865-574-4986 Fax : 865-574-4902
Ward Plummer	CNMS, responsable du thème : Systèmes de matériaux nanophasés complexes
Chercheur à l'ORNL et l'Université du Tennessee (Physique)	Mail : Tél. : (865) 574-8782 Fax : 865-576-8135
Peter Cummings	CNMS, responsable du thème : Théorie/Modélisation/Simulation, Nanomaterials Theory Institute
Chercheur à l'ORNL et l'Université du Tennessee (Génie chimique, chimie, simulation)	Mail : cummingspt@ornl.gov Tél. : 865-241-4779 Fax : 865-574-6843
Michael Simpson	CNMS, responsable : Nanofabrication Research Laboratory
Oak Ridge National Laboratory http://www.ornl.gov/	Mail : simpsonml1@ornl.gov Tél. : 865-574-8588 Fax : 865-576-2813
Linda Horton	CNMS, responsable : Installations, Infrastructures, activités
Directeur du programme BES/ORNL pour les sciences des matériaux métalliques et céramiques ORNL	Mail : hortonll@ornl.gov Tél. : 865-574-5081 Fax : 865-574-4066
John Cooke	CNMS, responsable proposition de travail
Directeur de la Solid State Division, ORNL	Mail : cookejf@ornl.gov Tél. : 865-574-6151 Fax : 865-574-4143
James Roberto	Directeur associé de l'Advanced Materials, Physical, and Neutron Science
Oak Ridge National Laboratory http://www.ornl.gov/	Mail : robertojb@ornl.gov Tél. : 865-574-4750 Fax : 865-574-0323

Collaborations et Interfaces :

Le CNMS accorde une grande importance à la communauté scientifique et à la formation afin de développer un environnement très interactif et multidisciplinaire pour la formation nano-scientifique. Un accès simplifié à ses divers équipements (CNMS et ORNL) devrait être mis en place pour la communauté scientifique. Le CNMS constituera une grande équipe de travail avec le rassemblement de compétences issues des universités, de l'industrie et de l'ORNL. Il accueillera un nombre important de post-doctorants et dispensera une formation scientifique aux étudiants. Il comptera aussi sur l'aide technique d'experts, la formation continue et la

collaboration scientifique ; on peut citer dans le cadre de ses échanges avec les universités les étroites relations qu'entretient l'ORNL et le Center for Nanoscience & Nanotechnology de Georgia Tech (<http://www.gatech.edu>). Il sera aussi le premier centre « nano » dans l'utilisation des neutrons. Les relations avec les autres centres NSRCs sont en discussion, comme d'ailleurs celles avec d'autres laboratoires fédéraux, nationaux, universitaires et industriels (colloques, associations, etc.).

Une liste de chercheurs et laboratoires de grands intérêts a été définie pour le CNMS en vue de futures collaborations (confère le transparent N°4, présentation de Doug Lowndes lors de la conférence BESAC en Novembre 2001 : <http://www.sc.doe.gov/production/bes/BESAC/BESACLowndespt2-11-14-01.ppt>) :

Chercheurs	Centres
<ul style="list-style-type: none"> ● J. Bernholc (North Carolina State University, http://nemo.physics.ncsu.edu/~bernholc/) ● J.K. Blasie (University of Pennsylvania, http://www.sas.upenn.edu/chem/faculty/blasie/blasie.html) ● W. Butler (University of Alabama – Center for Materials for Information Technology (MINT Center, http://bama.ua.edu/~mint/butler.html)) ● R. Compton (http://www.phys.utk.edu/1compton.htm) , G. Saylor (http://bio.lsd.ornl.gov/gst/staff/saylor.html) : University of Tennessee ● S. Das Sarma (University of Maryland, http://www.physics.umd.edu/rgroups/sst/index.html) ● H. Dorn (Virginia Tech, http://www.chemistry.vt.edu/chem-dept/dorn/dorn.htm) ● L. Feldman, R. Haglund, S. Pantelides, S. Rosenthal (Vanderbilt University, http://www.physics.vanderbilt.edu/) ● S. Glotzer (University of Michigan, http://msewww.engin.umich.edu/people/faculty/display?name=Glotzer) ● E. Grulke (University of Kentucky, http://www.caer.uky.edu/about.htm) ● R. Hull (University of Virginia, http://www.virginia.edu/ms/hull/rh.html) ● J. Mays (University of Alabama à Birmingham., http://www.chem.uab.edu/) ● A. J. Millis (Rutgers, http://www.physics.rutgers.edu/~millis/) ● T. Russell (University of Massachusetts, http://www.pse.umass.edu/mrsec/overview.html) ● D. Schlom (Penn State University, http://www.ems.psu.edu/~schlom/) ● Z. L. Wang (Georgia Tech, http://www.mse.gatech.edu/people/faculty/wang/wang.html) ● B. Yakobson (Rice University, http://mems.rice.edu/yakobson/) 	<ul style="list-style-type: none"> ● NSF Polymers and Biomaterials MRSECs at U. Mass., U. Penn., Princeton, UCSB, U. Minn. + others (http://www.mrsec.org/centers/) ● U. Alabama MINT Center (http://bama.ua.edu/~mint/index.html) ● Georgia Tech, Center for Nanoscience & Nanotechnology (http://www.gatech.edu) ● U. Louisville Center for Nanotechnology (http://pyramid.spd.louisville.edu/~eri/) ● U. Michigan Center for Computational Materials Research (http://msewww.engin.umich.edu/) ● North Carolina Center for Nanoscale Materials (http://www.physics.unc.edu/~zhou/muri/nccnm.html) ● Rice U. Center for Nanoscale Science and Technology (http://cnst.rice.edu/) ● U. Tennessee: Center for Environmental Biotechnology (http://www.ceb.utk.edu) and Tennessee Advanced Materials Laboratory (http://www.phys.utk.edu/taml_scholar.htm) ● Vanderbilt Institute for Nanoscale Science, Engineering and Biotechnology, and Laser Science Center (http://www.vanderbilt.edu/) ● U. Virginia Center for Nanoscopic Materials Design (http://www.mrsec.virginia.edu/shared/) ● CINT (Sandia / Los Alamos): http://nano.sandia.gov/NCINT.htm ● Molecular Foundry (LBNL, http://www.lbl.gov/) ● NASA Centers of Excellence : Langley (http://www.larc.nasa.gov/), Ames (http://www.arc.nasa.gov/) ● National High Magnetic Field Laboratory (http://www.magnet.fsu.edu/) ● NIST: Polymers Division (http://polymers.msel.nist.gov/) & Center for Neutron Research (http://www.ncnr.nist.gov/)

Le CNMS organisera aussi des colloques spécifiques très axés industrie, sur le modèle des méthodes déjà employées par l'ORNL pour le transfert de technologie vers l'industrie et les Cooperative Research And Development Agreements (CRADA, <http://www.icann.org/committees/dns-root/crada.htm>).

La création du CNMS s'accompagnera d'un réel effort sur la formation en nanoscience d'une nouvelle génération de scientifiques :

- Infrastructures : organisation, personnel et équipement (en complément des installations déjà existantes)

- Collaboration initiale avec 19 universités : Clemson, Duke, Florida State, Georgia Tech, Harvard, Kentucky, MIT, Minnesota, North Carolina State, Northwestern, Penn State, Princeton, U. Alabama at Birmingham, U. Massachusetts, U. North Carolina, U. Tennessee, U. Virginia, Vanderbilt, Virginia Tech.

Recherche et Développement

Le CNMS va orienter sa recherche scientifique « nano » dans trois thématiques avec de fortes synergies et un soutien académique :

- La science neutronique (SNS et High Flux Isotope Reactor Facility (HFIR amélioré <http://www.ornl.gov/hfir/hfirhome.html>)) : capacités uniques de balayage pour comprendre les matériaux et les processus à l'échelle neutronique, nanoscience.
- La science de la synthèse (Nanofabrication Research Laboratory) : outils des nouvelles générations de matériaux, synthèse via TMS (Théorie, Modélisation, Simulation), développement de méthodes nouvelles et efficaces.
- Théorie / Modélisation / Simulation (Nanomaterials Theory Institute) : développer l'utilisation de la TMS pour la conception et la synthèse de nouveaux matériaux.

Avec le Spallation Neutron Source (SNS, http://www.sns.gov/sns_home.htm), l'ORNL dispose d'un outil unique pour compléter les données à propos de l'auto-organisation à l'échelle nanométrique :

- sondes sub-surfaciques pour étudier l'organisation nanométrique dans des corps de matériaux en 3-D,
- environnements complexes et matériaux délicats (biologiques),
- analyse de structures : de l'atome aux macromolécules, fluctuations statiques et dynamiques,
- énergies neutroniques (~meV) : information dynamique,
- large coupe transversale pour H et D (hauteur/profondeur) : marquage H/D de molécules et systèmes biologiques complexes,
- sections de balayage proportionnelles aux fonctions de corrélation dynamique (lien avec les descriptions mathématiques de systèmes complexes et interdépendants ; comportements collectifs nanométriques couplés).

De nouveaux instruments pourraient aussi répondre aux problèmes inhérents dans les sciences neutroniques pour l'échelle nanométrique :

- Mesures directes des longueurs de corrélation (statique et dynamique) associées dans des systèmes électroniques hautement corrélés : séparation de phase électronique et de niveaux fondamentaux en compétition,
- Compréhension des processus aux interfaces solide-liquide, et leur évolution du macro au nano,
- Identification des différences entre états activés et inactivés de produits catalytiques par balayage neutronique inélastique (sensibilité mono-couche),
- Mesures directes in situ : cinétique de séparation de phases à l'échelle nanométrique,
- Compréhension des composants et des interactions de multi-protéines complexes pour le contrôle de « machines moléculaires » pour nanostructures fonctionnelles et nanotechnologies,
- Mesures simultanées et temporelles de structures atomiques et nanométriques : durant la synthèse et l'utilisation, dans des environnements spécifiques, organisation hiérarchique des matériaux,
- Etudes du magnétisme à l'échelle nanométrique : structure artificielle en couches minces, réflectomètre magnétique.
- Analyse de Matériaux mous et Systèmes complexes de matériaux nanophasés.

Trois thèmes scientifiques, plus un nouveau laboratoire, sont envisagés :

- Matériaux mous,
- Systèmes complexes de matériaux nanophasés,
- Nanomaterials Theory Institute : Théorie/Modélisation/Simulation,
- Nanofabrication Research Laboratory.

Thèmes R&D:**Matériaux mous**Responsable : Michelle Buchanan, buchananmv@ornl.gov

Nanophases organiques, interfaciales et hybrides :

- Polymères synthétiques et matériaux bio-inspirés (élaboration de structures 3-D fonctionnalisées et/ou aux propriétés contrôlées, assemblage supramoléculaire de macromolécules, supraconducteurs organiques)
 - o Contrôle de la synthèse d'architecture macromoléculaire,
 - o Systèmes hybrides macromoléculaires,
 - o Contrôle de phénomènes interfaciales,
 - o Changement d'échelle Structures et Propriétés : du nano au macro ,
 - o Caractérisation des interfaces,
- Modélisation structurale et dynamique pour des phases condensées.
- Systèmes dominés par des interconnexions organiques-inorganiques (nature, transmission et mesures de données à travers ces interfaces, contrôle des interactions, théorie)
- Interfaces nanostructures et systèmes biologiques : de la synthèse à la transduction de signal (synthèse, fonctionnalisation et assemblage contrôlés, communication à l'interface)
- Electronique à l'échelle moléculaire (théorie, transport et manipulation de charge)

Systèmes complexes de matériaux nanophasés

Responsable : Ward Plummer

Sujets transverses aux interfaces, réduction dimensionnelle :

- o Nanostructures à base carbone : croissance, production, fonctionnalisation.
- o Compréhension et Manipulation nanométrique : séparation de phases dans des matériaux liés, phénomènes collectifs, effets de réduction d'échelles, propriétés magnétiques et conduction aux interfaces.
- o Matériaux magnétiques nanostructurés : synthèse et assemblage, confinement dimensionnelle, contrôle du spin, agrégats, décohérence, magnétoresistance.
- o Science de l'interface à l'échelle nanométrique (nanoparticules et nanograins) : compréhension et exploitation, mécanismes de déformation, thermodynamique.

Nanomaterials Theory Institute (NTI)Responsable : Peter Cummings, cummingspt@ornl.gov

Les objectifs de ce nouveau laboratoire sont de :

- Etre le centre d'excellence pour la modélisation des nanomatériaux : sciences théoriques et informatiques,
- Rassembler les meilleures compétences : laboratoires gouvernementaux, universités et industries,
- Développer les frontières des nanosciences,
- Améliorer les méthodes théoriques et informatiques nécessaires pour comprendre les sciences nanométriques et exploiter les nanotechnologies.

Le NTI devrait résoudre 4 classes de problèmes :

1. les expériences dirigeant la théorie (balayage neutronique),
2. le partenariat et les expériences (électronique moléculaire),
3. la théorie dirigeant les expériences (informatique quantique),
4. les nouveaux paradoxes théoriques ou les méthodes développées pour la compréhension (développement de méthodes multi-échelles).

L'approche du NTI pour chaque objectif sera d' :

- Elaborer des équipes multi-institutionnelles et multi-disciplinaires au sein d'un partenariat laboratoires nationaux, universités et industrie,
- Utiliser les équipements informatiques de haute performance (Center for Computational Sciences, <http://www.ccs.ornl.gov/>).

La R&D de ce laboratoire s'appuie sur les mots-clé Théorie, Modélisation, Simulation (TMS), ainsi que sur le soutien de High Performance Computing Research Center (Center for Computational Sciences, <http://www.ccs.ornl.gov/>)

- Synthèse virtuelle et conception de nanomatériaux : chimie-structure-propriétés, thermodynamique et cinétique, changement d'échelle, optimisation et prévisions (matériaux et procédés),
- Science théorique des nano-interfaces : TMS multi-échelle (interactions/interfaces de tout type, transport/transfert aux interfaces, influences aux interfaces à l'échelle macro, matériaux conceptualisés pour l'électronique et l'intégration moléculaire, les détecteurs chimiques et biomédicaux).

Nanofabrication Research Laboratory (NRL)

Responsable : Michael Simpson, : simpsonml1@ornl.gov

Le NRL sera opéré comme une installation de recherches régionale au sein du CNMS, en collaboration avec la communauté universitaire. Il intégrera les approches pour les matériaux mous et durs (thèmes précédents) dans des structures identiques, par la réalisation de recherches sur des auto-assemblages directs. Ce laboratoire développera des capacités de nanofabrication uniques avec l'exploitation de capacités de synthèse extensives.

L'accès aux salles blanches, lithographies par faisceau électronique, à la microscopie électronique à haute résolution, aux moyens d'analyses variées par balayage, et aux équipements de pointe pour le support des matériaux, devrait être facilité.

Sujets d'études :

Les sujets d'études porteraient sur :

-nanoparticules, catalyse (nanostructures), photonique (confinement quantique et propriétés optiques, points quantiques, cristaux photoniques, etc.).

Contacts (ORNL) : Greg Schaff, Jack Wells.

-nanostructures à base de carbone et nanostructures connexes (nanotubes de carbone (mécanisme de croissance, fonctionnalisation chimique, électronique moléculaire, composites), fullerènes et métallofullerènes, simulation en croissance, stockage d'hydrogène, etc.).

Contacts (ORNL) : Dave Geohegan (Expérimentation), Zhenyu Zhang (Théorie).

-matériaux nanophasés fonctionnels (transition de phase, phénomènes coopératifs dans des dimensions réduites, magnétisme nanométrique, séparation de nanophases, science neutronique, stockage et utilisation d'énergie, relation structures-propriétés à l'échelle nanométrique, etc.).

Contacts (ORNL) : David Mandrus, Ward Plummer, Linda Horton, Claudia Rawn, Igor Kosacki, Shen Dai, Randy Fishman, Hans Christen.

-nanomatériaux hybrides et fonctionnels (matériaux biomimétiques, électronique moléculaire, nano-biotechnologies, nanomécanique, systèmes nano-analytique, science neutronique, etc.).

Contacts (ORNL) : Mitch Doktycz, Mike Simpson.

-polymères synthétiques et matériaux biologiques (auto-assemblage et auto-organisation de matériaux synthétiques, biologiques et hybrides (block co-polymères, membranes, etc.), fonctionnalisation des matériaux, matériaux mésoporeux, science neutronique, etc.).

Contact (ORNL) : Phil Britt.

Exemples de sujets impliqués dans le CNMS pour les technologies de l'énergie :

- Fuel cells (nanostructured ionic conductors)
- Catalysts (improved efficiency and selectivity)
- Clathrates (carbon sequestration and energy supply)
- Sensors (highly specific environmental sensors)
- Energy transmission materials (next generation superconductors)
- Materials with improved thermal conductivity, electrical conductivity, etc. for energy applications
- Structural materials (light weight, high strength nano-composites)
- Energy storage (carbon-based nanostructures)
- Improved magnets (lighter weight motors)
- Energy generation (nanostructured photovoltaics) Self-assembled ordered materials (membranes for separation)

MOLECULAR FOUNDRY, LAWRENCE BERKELEY NATIONAL LABORATORY

Présentation du Molecular Foundry lors de la conférence BESAC en Novembre 2001 :

<http://www.sc.doe.gov/production/bes/BESAC/BESACAlivisatos11-14-01.ppt>

et lors de la conférence d'Avril 2002 : <http://foundry.lbl.gov>

Introduction

Lawrence Berkeley National Laboratory (<http://www.lbl.gov/> , LBNL)

Le LBNL, situé à Berkeley CA, fondé en 1931 est le plus ancien des laboratoires nationaux des Etats-Unis. Il est l'un des nombreux laboratoires nationaux financés par le DoE (http://www.sc.doe.gov/sub/lab_map/index.htm). Ce laboratoire est toutefois administré par l'Université de Berkeley, Californie (de même que les centres de Los Alamos, NM ou Lawrence Livermore, CA). L'Université de Californie regroupe 10 campus (Berkeley, Los Angeles, Santa Cruz, Davis, Santa Barbara, San Francisco, Irvine, San Diego, Riverside, Merced).

Il s'agit d'un laboratoire multidisciplinaire pour résoudre des problèmes clé pour l'informatique de haute puissance, l'environnement, l'énergie, le rendement énergétique, la carte du génome, etc. Le LBNL est le seul laboratoire du DoE où il n'y a pas de recherches militaires, c'est un laboratoire multidisciplinaire. Le domaine de la Physique Nucléaire (haute énergie) ne représente que 20% des programmes de recherches, contrairement aux sciences liées aux basses énergies (Science des Matériaux et de la Vie). La qualité scientifique est assurée par un lien étroit entre universitaires (chercheurs et étudiants, principalement de UC-Berkeley) et chercheurs du LBNL. Beaucoup de chercheurs qui travaillent au LBNL sont aussi professeurs universitaires, ce qui leur permet d'avoir une flexibilité certaine et non-négligeable (réorientation).

Il possède aussi de nombreux équipements scientifiques de pointe (*Facilities*), tel que l'Advanced Light Source (ALS, <http://www-als.lbl.gov/>) et le National Energy Research Scientific Computing Center (NERSC, <http://www.nersc.gov/>). Le centre s'étend sur 130 acres à proximité de UC Berkeley. Le budget annuel est d'environ \$389 millions (chiffre de 1997-98).

Avec de fortes relations industrielles et universitaires, ce laboratoire emploie environ 3500 personnes dont 1300 scientifiques et ingénieurs (dont 240 chercheurs au LBNL sont aussi professeurs à l'université de Californie à Berkeley), 600 thésards et 400 post-doctorants, avec 500 personnels de gestion et d'administration, 1700 techniciens, plus les équipes d'assistance. Le laboratoire accueille aussi annuellement près de 2000 chercheurs invités américains ou étrangers. Il se trouve à proximité de UC Berkeley avec 35 000 personnes, ce qui assure un capital intellectuel unique aux Etats-Unis (seul endroit au monde avec une université de première catégorie à côté d'un laboratoire national de très haut niveau). Daniel Chemla parle de production de « cerveaux ». Beaucoup de chercheurs ont reçu des distinctions et récompenses. Bien que le LBNL reçoive \$30 millions par an du DoE pour payer ses chercheurs, la plupart sont aussi payés pendant 9 mois au moins par l'Université de Berkeley, ce qui garantit une aide financière importante.

Materials Science Division (MSD, <http://www.lbl.gov/msd/>)

Le but de la MSD est de sélectionner des problèmes importants et de les résoudre avec de nouvelles théories, synthèses, procédés et méthodes analytiques pour tout matériau (matériaux électroniques, métaux, alliages, céramiques, polymères, catalyseurs, matériaux bio moléculaires). Les réponses techniques (d'échelle atomique) peuvent améliorer les procédés au niveau des rupture et fatigue des métaux et céramiques, tout comme le développement de matériaux fonctionnels pour les capteurs, les piles à combustible et les batteries. Les applications des découvertes du MSD vont des détecteurs à Infra-Rouge pour les satellites aux détecteurs magnétiques ultra-sensibles pour la médecine et l'exploitation minière (pétrole), et aux matériaux améliorés pour les valves de cœur artificiel, aux renforts pour les ponts d'autoroutes.

Organisation :

Organigramme de la MSD du LBNL : http://www.lbl.gov/msd/msd_org.gif .

De grands moyens sont en plus à proximité, comme :

- Le National Center For Electron Microscopy (NCEM, <http://ncem.lbl.gov/ncem.html>, micro caractérisation (à l'échelle de l'Angstrom)).
=> Ce centre permet d'étudier entre-autres les effets de dimensions quantiques (structure électronique, les effets d'optiques, les tailles magiques), la thermodynamique fonction de l'échelle (solubilité, point de fusion), ou les réactivités chimiques modifiées (surface active, sites spécifiques).
- Le Center for X-Ray Optics (CRXO, <http://cindy.lbl.gov/>) avec des applications en lithographie avec des nano pointes aux structures à 2,5Å (Physique, Chimie, Structure des Matériaux).
- L'Advanced Light Source (ALS, <http://www-als.lbl.gov/>) assure l'observation et l'élaboration de nanostructures grâce à des générateurs de faisceaux lumineux ultra-violet et Rayon-X, et de rayonnement synchrotron de troisième génération.
- Le National Energy Research Scientific Computing Center (NERSC, <http://www.nersc.gov/>).
- Le Center for Advanced Materials (CAM) où les équipes de recherche sont mises en commun.
=> L'objectif du centre est l'étude des matériaux d'une manière générale, mais aussi tout ce qui s'y rapporte. Les recherches sont compatibles avec le programme du DoE (programme multi-disciplinaire, tout champ d'étude (organique, semi-conducteurs, supra conducteurs, etc...)).

R&D :

La MSD est plus orientée sur la science des matériaux, la physique et la chimie, plus d'autres sujets en marge comme la biochimie, l'énergie électrique et nucléaire, ou encore la chimie énergétique. Ils ont tout pour progresser : les moyens techniques (par exemple leurs mesures optiques par interféromètre (?/330 à 13nm) descendent à 1000 Å (et prévoit 300 Å)) et les moyens financiers (il est plus facile d'avoir des financements aux Etats-Unis qu'en France d'après Daniel Chelma).

En ce qui concerne les nanosciences, la MSD est consciente de l'importance des interférences nano/macro et des systèmes fonctionnels. Ils se dirigent actuellement vers l'élaboration d'entités nanométriques, l'assemblage de composants multi-fonctionnels, le comportement fonctionnel/ non-linéaire/ collectif, les interactions fonction/ dynamique/ dualité espace-temps. Des synergies existent de plus entre les matières condensées et molles, entre les approches « bottom-up » et « top-down », entre la théorie, les expériences et la modélisation.

Sujets de recherche actuels :

- Etude sur les diagrammes de phase, forme/ dimensions/ point de fusion,
- Au niveau matériaux : nanotubes, nano barres en CdSe, nano fils en ZnO, nanocristaux,
- Elaboration par assemblage contrôlée de manière parfaite,
- Observation des règles et propriétés aux dimensions atomiques où les règles physiques à l'échelle macro ne s'appliquent plus, et donc où de nouvelles théories sont à trouver,
- Etude de mélanges matière condensée et matière molle : étiquetage, vers une culture nanométrique,
- La synergie « top-down » et « bottom-up » avec l'utilisation de la lithographie,
- Les problèmes de calcul et de modélisation apparaissent avec le développement « nano », il faut reconsidérer les modèles macro. Pour les molécules de l'ordre atomique (taille 1-100 atomes), les calculs ab initio suffisent, pour les entités plus importantes, on peut associer la méthode de la masse apparente ; mais pour les nanostructures (10^3 - 10^6 atomes), on doit chercher de nouvelles méthodes (symétrie correcte, surface, zone de Brillouin entière, prévisions quantitatives, connections aux calculs ab initio).

Présentation

Molecular Foundry

Le LBNL fait donc partie du grand projet « Nano », lancé par le DoE, en faisant partie des trois NRSCs choisis, avec un nanocentre qui porte l'appellation : *Molecular Foundry* : the synthesis and design of nano-objects & molecules, and their assemblies in functional systems at the nanoscale level.

(Confère l'exposé de Daniel Chemla représentant du projet pour le LBNL : <http://www.sc.doe.gov/production/bes/BESAC/NanoLBNL.ppt>).

La Molecular Foundry sera un centre national d'équipements de recherches pour la science et l'ingénierie à l'échelle nanométrique, et en étant une porte d'accès aux autres *facilities* du LBNL. Le programme de ce nanocentre s'orientera vers une politique de formation pour former la première génération de nano scientifiques avec des programmes internes de recherches en nanoscience au LBNL.

D'autre part, un colloque était organisé en avril 2002, pour :

- Informer la large communauté scientifique nationale des plans pour établir la Molecular Foundry,
- Identifier les ressources nécessaires (équipements et compétences),
- Se coordonner avec les autres National Nanoscience Research Centers,
- Mettre en place les procédures pour répondre aux besoins logistiques des utilisateurs de la Foundry.

Organisation

En axant sa politique sur la multi-disciplinarité (ingénierie, science des matériaux, physique, chimie, et biologie), la Molecular Foundry devrait orienter ses recherches, en étroite collaboration avec les laboratoires gouvernementaux, les universités et l'industrie, dans la synthèse, la caractérisation et la modélisation de nanostructures et d'assemblages complexes de nanostructures. Un manuel d'utilisation du nanocentre sera réalisé pour les scientifiques extérieurs cherchant un accès à des instruments et compétences de pointe reconnus dans la communauté scientifique.

Objectifs & Challenges :

Il s'agira d'une Facility pour créer des matériaux nanométriques, avec comme objectifs

- une révolution dans la fabrication des matériaux
- une « sorte de micro laboratoire » :
 - o Possibilité pour les utilisateurs de conceptualiser, synthétiser, et caractériser des matériaux nouveaux et complexes,
 - o Fournir aux utilisateurs un accès rapide aux ultimes développements dans l'élaboration des matériaux.
- une certaine flexibilité :
 - o Multidimensionnalité : de l'atome au macro
 - o Toutes les méthodes de procédés de structure (lithographie, culture de cellules, manipulation d'atomes, etc.)
 - o Synergies entre les différents techniques (multi-disciplinarité)

La Molecular Foundry devra être un complément dans les activités nano aux Etats-Unis des équipements et compétences nationaux déjà existants :

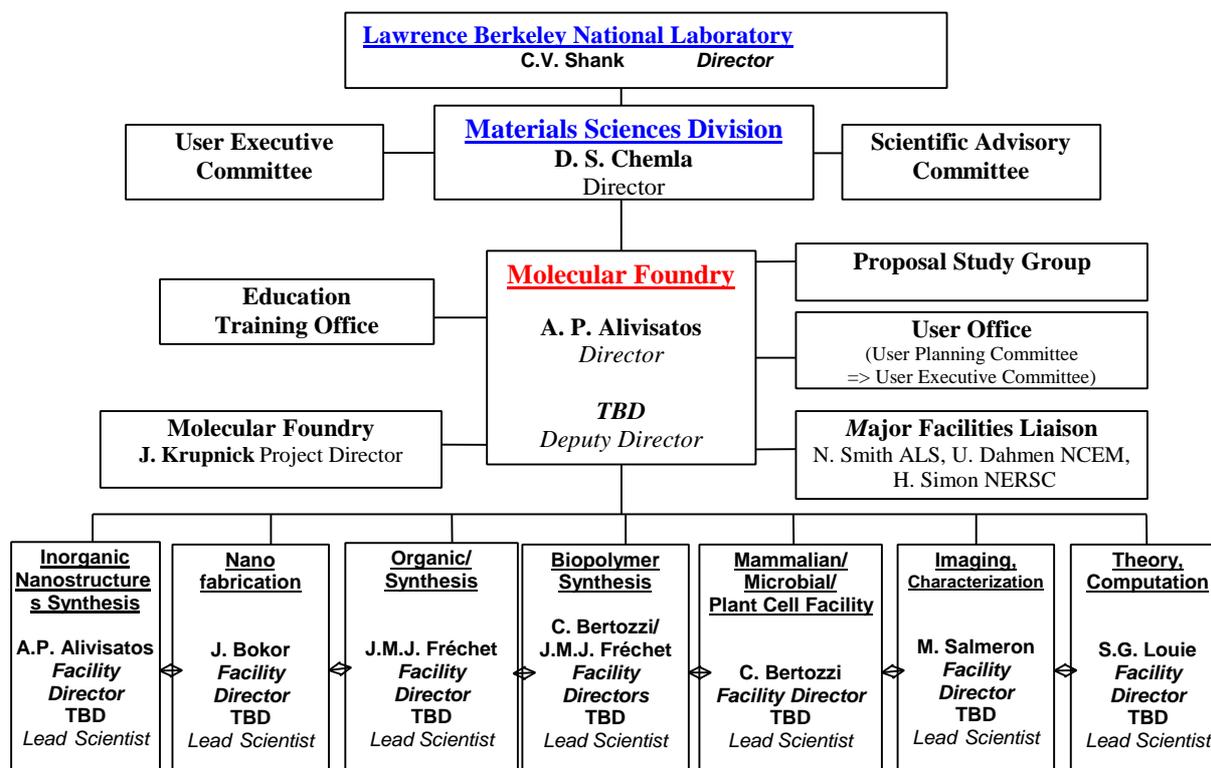
- Multidisciplinarité
- Rôle de *facility*
- Relations directes avec les plus importants équipements de caractérisation pour les nanosciences : ALS et NCEM.
- Programme interne fort en nanoscience
- Ouverture sur la formation avec une importante participation académique
- Ouverture pour tous les utilisateurs qualifiés sans frais

- Collaborations diverses
 - o autres NSRCs (représentant au CINT, et projets communs),
 - o autres centres de nanosciences : California Institutes for Science and Innovation (<http://www.ucop.edu/california-institutes/welcome.html>), NSF National Nanofabrication Facilities NNUN (<http://www.nnun.org/>), NSF NSECs (http://www.nsf.gov/home/crssprgm/nano/centers_01.htm)
 - o et autres activités de recherches en nanosciences.

Structure :

Les comités consultatifs sont :

- Proposal Study Group : Etude de l'intérêt, de la faisabilité, et des capacités des experts en relation avec les projets proposés, sous la direction du directeur de la Molecular Foundry, et de scientifiques reconnus de la Molecular Foundry ou d'autres institutions.
- Scientific Advisory Committee : Revue des opérations, de la politique et de la mise en application de la Molecular Foundry, avec des avis sur les opérations courantes, la répartition des ressources, les plans stratégiques, et le budget, plus revue de gestion / organisation des laboratoires du centre, sous la direction du directeur de la Materials Sciences Division, avec la représentation d'autres institutions, avec la présidence du Proposal Study Group et de l'Executive User Committee.
- Executive User Committee : Revue des résultats (réunions bi-annuelles, conférences téléphoniques fréquentes), sous la direction du directeur de la Materials Sciences Division, et des représentants élus par les utilisateurs de la Molecular Foundry.
- User Planning Committee (futur User Executive Committee): Assistance dans la structure organisationnelle et physique des laboratoires du centre durant sa mise en place (et par la suite), sous la direction de scientifiques issus de la communauté des utilisateurs, et de représentants de chaque *facility* du LBNL.



Futur organigramme de la Molecular Foundry

Contacts (récoltés par Benjamin Grenier, lors d'entretiens en février 2002)

Professeur Paul Alivisatos	Directeur de la Molecular Foundry
Materials Sciences Division , LBNL Chemistry and Materials Science, UC Berkeley B-62 Hildebrand Hall Berkeley, CA 94720 USA	Mail : alivis@uclink4.berkeley.edu Tél. : (510) 643-7371
Dr Daniel Chelma	Directeur, Materials Sciences Division , et Advanced Light Source , LBNL
Materials Sciences Division Lawrence Berkeley National Laboratory 1 Cyclotron Road, MS 66 Berkeley, CA 94720 USA	Mail : DSChemla@lbl.gov Tél. : (510) 486-4999 Fax (510) 486-7768
Mark Alper	Directeur adjoint de la Materials Science Division
Materials Science Division Lawrence Berkeley National Laboratory Berkeley, CA 94720-1460 USA	Mail : MDAlper@lbl.gov Tél. : (510) 486-6581 Fax (510) 643-7768
Professeur John Clarke	Reponsable du service Physique des Matériaux, Materials science Division, LBNL
Department of Physics, UC Berkeley 366 LeConte Hall Berkeley, CA 94720-7300 USA	Mail : jclarke@physics.berkeley.edu Tél. : (510) 642-3069 Fax (510) 642-1304
Professeur Jean Fréchet	Responsable du service Chimie des Matériaux, Materials science Division, LBNL
Department of Chemistry, UC Berkeley 718 Latimer Hall #1460 Berkeley, CA 94720-1460 USA	Mail : frechet@cchem.berkeley.edu Tél. : (510) 643-3077 Fax (510) 643-3079
Daniele Geron	Thésard dans le groupe d'Alivisatos, Chemistry and Materials Science, UC Berkeley
Chemistry and Materials Science, UC Berkeley Hildebrand Hall Berkeley, CA 94720 USA	Mail : gerion@uclink4.berkeley.edu

Collaborations & Interfaces :

La Molecular Foundry s'orientera sur une forte politique de formation et collaboration, avec la présence d'environ 850 étudiants (dont 550 d'études supérieurs), 250 post-doctorants, et de plus de 400 chercheurs invités (sans compter les utilisateurs des différentes facilities).

Des collaborations sont déjà en cours avec :

- Les universités :
 - o au niveau régional UC Berkeley, Davis, Los Angeles, Santa Barbara, San Diego, San Francisco ; Stanford, Scripps,
 - o au niveau national avec de nombreuses universités américaines.
- Les industries en cours : Intel, IBM, Dupont, Seagate, Exponent, Quantum Dot, CibaVision, Advanced Micro Devices, Shipley, Motorola, Dow Chemical, Inframat, Delphi Interconnect, Agilent, Lumileds, Advanced Materials, HP, Novartis, etc.

La formation d'une nouvelle communauté nano-scientifique se fera à travers de simples cours, des écoles d'été, des formations aux instruments, des séminaires pour les visiteurs, de nombreux stages (techniciens), etc. Il fonctionnera sur le même principe que l'Advanced Light Source Beamline Scientists, avec un partenariat entre des chercheurs spécialistes au LBNL et des partenaires extérieurs qui ont de grandes idées mais pas les moyens

d'instrumentation en rayonnement synchrotron souvent nécessaires inexistantes dans l'industrie ou les universités, notamment dans le cadre des nanotechnologies.

Les utilisateurs pourront être classés selon quatre catégories :

- Formation sur une technique particulière,
- Formation sur l'utilisation des équipements,
- Développement de nouvelles méthodes en collaboration avec les scientifiques de la Molecular Foundry,
- Formation pour répliquer de nouveaux instruments pour son propre institut.

Diverses récompenses devraient être réparties dans la communauté des utilisateurs pour les scientifiques visiteurs, les experts de marque, et les étudiants.

Infrastructure :

Le nanocentre devrait bénéficier d'équipements de pointe sous la responsabilité d'experts, de chercheurs compétents permanents, de scientifiques collaborateurs spécialisés et de post-doctorants, d'une équipe de techniciens. La Molecular Foundry se tournera vers un programme interne de recherches en vue de l'amélioration pour chaque thème proposé, un budget pour la maintenance, plus l'amélioration et le remplacement (personnel et équipements) sans frais pour les utilisateurs.

Dans les 7 thèmes R&D développés par la Molecular Foundry (nanostructures inorganiques, nano-fabrication, synthèse organique, bio-polymères, culture de cellules, imagerie, théorie), un groupe de 310 personnes devrait être employé, dont 7 scientifiques responsables de chaque sujet, 11 chercheurs, 14 techniciens, 50 étudiants (dont 17 de cycle supérieur et 17 post-doctorants) pour en tout 310 projets. Les post-doctorants seront employés selon le même processus que celui du NCEM.

La construction d'un bâtiment, d'une superficie de 5300 m², devrait débuter en 2003 à côté de l'ALS et proche du NCEM. Il devrait se composer de laboratoires de nanofabrication, de synthèse inorganique, organique, et de bio-polymères, de l'imagerie, pour la théorie et la culture de cellule, ainsi que des zones pour l'administration et la direction, et un espace d'accueil.

Les partenaires de la Molecular Foundry devraient avoir un accès privilégié aux autres *facilities* du LBNL, dont entre-autres : l'Advanced Light Source, le National Center for Electron Microscopy, le National Energy Research Scientific Computing Center, l'E-beam Nanowriter-Nanofabrication Facility, le Surface Science Facility, et le "Micro/MEMS" Laboratory. La répartition des utilisateurs de la Molecular Foundry devrait être majoritairement universitaire, 25 % interne, avec des projets dans différents domaines.

Recherche & Développement

Ce futur nanocentre possède déjà, à travers la MSD, des compétences dans l'élaboration de blocs nanométriques (association de matériaux durs et mous) : nanocristaux, nanotubes, dendrimères, pointes/buses pour les sondes de balayage, surfaces fonctionnalisées, membrane de cellules, ADN, protéines, etc. Les nanosciences prochainement développées au sein de la Molecular Foundry, nécessiteront l'utilisation de multiples techniques pour la manipulation et le contrôle de la matière, ce que pourrait procurer la Foundry : association Conception, Synthèse, Mesures, et Analyses.

Thèmes :

Les études du futur nanocentre porteront sur les sept thèmes suivants :

Synthèse inorganique de nanostructures

Responsable : A.Alivisatos, APAlivisatos@lbl.gov

Sujets : CVD, MBE, ablation laser, synthèse nanométrique automatisée

Nano-fabrication

Responsable : J.Bokor, JBokor@lbl.gov

Sujets : lithographie à faisceau électronique, lithographie douce et microcontact

Synthèse organiqueResponsable : J.Fréchet, J_Frechet@lbl.gov

Sujets : MRN, pulvérisation électronique / spectrométrie de masse MALDI, spectroscopie / chromatographie, peptides / ADN / glucides, hybrides

Synthèse de biopolymèresResponsable : C.Bertozi (bertozi@cchem.berkeley.edu) et J.Fréchet (J_Frechet@lbl.gov)

Sujets : MRN, pulvérisation électronique / spectrométrie de masse MALDI, spectroscopie / chromatographie, peptides / ADN / glucides, hybrides

Culture de cellules mammaires, microbiennes et de plantesResponsable : C.Bertozi, bertozi@cchem.berkeley.edu

Sujets : bio-hotte, incubateurs, microscopes et spectroscopies

Imagerie et CaractérisationResponsable : M.Salmeron, MBSalmeron@lbl.gov

Sujets : STM/AFM, MET, microsonde, fluorescence à simple molécule, faisceau d'ions focalisés, pinces typographiques optiques, équipements de spectroscopie à haute résolution

Théorie / Modélisation / Simulation (TMS)Responsable : S.Louie, MBSalmeron@lbl.govSujets : supercalculs, *Linux Box*.**Personnes impliquées :**

Sous la coupe du MSD, le LBNL travaille depuis longtemps à l'échelle nano, donc dans les nanosciences, avec des projets débutés en 1991 :

- Orientation des équipements de la MSD : NCEM et Center for X-Ray Optics
- Evolution des programmes de recherches vers les nanosciences :
=> Chercheurs : Alivisatos, Anderson, Bertozi, Bokor, Chemla, Chrakraborty, Clarke, Cohen, Crommie, Dahmen, Fadley, Fréchet, Haller, Kortright, Krishnan, Lilienthal, Louie, McEuen, Salmeron, Somorjai, Tomsia, Walukiewicz, Zettl, Schultz, McEuen.
- Investissements stratégiques :
=> Chercheurs : Bertozi, Bokor, Crommie, Davis, Dubon, Fréchet, Qiu, Yang, Francis, Groves.

Le LDRD finance 70% du budget LBNL MSD LRDR depuis 10 ans.

Paul Alivisatos (<http://www.cchem.berkeley.edu/~pagrp/>)

Etude de la synthèse de nanocristaux élaborés par injection de précurseurs organométalliques dans des surfactants purs et chauds pour des applications diverses telles que les composites polymères/nanocristaux pour diodes électroluminescentes (LEDs) et photovoltaïques, Single nanocrystal-single electron transistor, Conjugué anticorps/nanocristaux pour le marquage de molécules biologiques, DNA directed assembly of nanocrystal patterns, Photo-catalyse nano cristalline, Propriétés mécaniques de composites de nanocristaux.

Reconnu dans le monde « nanoscientifique », il va être à la tête du projet Molecular Foundry du LBNL.

J.Clarke (<http://ist-socrates.berkeley.edu/~jclarke2/>)

Etudes des dispositifs supraconducteurs à interférence quantique (Superconducting QUantum Interference Devices, SQUIDS) avec applications médicales (détection de champs magnétiques dans le cœur, ou magnéto-encéphalogrammes).

Jean Fréchet (<http://socrates.berkeley.edu/~jfrechet/>)

Etude des polymères, macromolécules et dendrimères (synthèse, fonctionnalisation) pour des applications en photosynthèse artificielle, en catalyse, pour les biomatériaux, les nano circuits, les systèmes de délivrance de médicaments, les conducteurs organiques, les marqueurs organiques, et les micro systèmes (réseaux fluidiques sans système mécanique mais avec des actionneurs polymères « matériaux intelligents »).

CENTER FOR FUNCTIONAL NANOMATERIALS, BROOKHAVEN NATIONAL LABORATORY

Présentation du futur Nanocentre lors de la réunion BESAC (février 2001) :

<http://www.sc.doe.gov/production/bes/BESAC/NanoBNL.ppt> .

Center for Functional NanoMaterials, Brookhaven National Laboratory <http://www.bnl.gov/nanocenter/>

Introduction

Le Brookhaven National Laboratory (BNL, <http://www.bnl.gov/>) est l'un des nombreux laboratoires nationaux financés par le Department of Energy (http://www.sc.doe.gov/sub/lab_map/index.htm). Le BNL est géré par les Brookhaven Science Associates, une société de direction à but non-lucratif, et sous contrat avec le Department of Energy des Etats-Unis. Etabli en 1947, ce laboratoire, dans lequel 4 prix Nobel ont été décernés, est le siège d'études stratégiques développées pour le DoE sur fond de recherches théoriques et appliquées dans des programmes multiples à long terme aux frontières de la science.

Le centre gère :

- Les équipements de recherches complexes, de pointe, conçus pour les utilisateurs, :
 - o Relativistic Heavy Ion Collider (RHIC, <http://www.bnl.gov/rhic/>)
 - o National Synchrotron Light Source (NSLS, <http://www.bnl.gov/bnlweb/facilities/NSLS.html>)
 - o Alternating Gradient Synchrotron (<http://www.bnl.gov/bnlweb/facilities/AGS.html>)
 - o Accelerator Test Facility (<http://www.bnl.gov/bnlweb/facilities/ATF.html>)
 - o Laser Electron Accelerator Facility (<http://www.chemistry.bnl.gov/sciandtech/prc/wishart/crcrintr.html>)
 - o Tandem Van de Graaff Facility (<http://www.bnl.gov/bnlweb/facilities/TVdG.html>)
 - o Autres: STM, TEM, Cyclotron, PET (<http://www.bnl.gov/bnlweb/facilities.html>)
- Le développement des technologies avancées qui s'adresse aux besoins vitaux du pays, ainsi que le transfert technologique aux industries,
- La diffusion du savoir technologique pour former les futures générations de scientifiques et d'ingénieurs,
- Le maintien de la fiabilité et des compétences du personnel ainsi que la sensibilisation du grand public.

R&D :

Les programmes majeurs sont :

- La Physique nucléaire et haute-énergie,
- La physico-chimie des matériaux,
- Les recherches sur l'environnement et l'énergie,
- La non-prolifération,
- Les neurosciences et l'imagerie médicale,
- La biologie structurale.

Effectif :

Le BNL compte environ 3000 personnes (scientifiques, ingénieurs, techniciens et employés), plus environ 4000 chercheurs invités par an, et se trouve à proximité de l'Université de Stony Brook University of New York (SUNY, <http://www.sunysb.edu/>). Pourtant, il semble manquer de main d'œuvre, même si le site possède des locaux d'accueil. Les collaborations y sont donc les bienvenues.

Financement :

Le BNL est financé ultra-majoritairement par le DoE à hauteur de \$434 millions (estimé pour l'année 2001), dont \$274.4 pour les Sciences, \$34 pour la qualité de l'environnement, \$36.1 pour la sûreté nationale, \$7.3 pour l'énergie. Le National Institute of Health participe aussi, dans une moindre mesure, au financement avec notamment des recherches sur les gènes au SNLS. Des compagnies privées, telles que IBM, Lucent Technologies, etc., co-financent par ailleurs de manière ponctuelle quelques projets.

Projet du Nanoscale Science Research Center

Le projet n'avait pas été retenu lors de la réunion BESAC en août 2001. Cependant, le DOE a annoncé le 14 juin 2002 le lancement de la construction du centre, estimée à \$85 millions. Le centre orientera sa recherche dans les domaines suivants : les changements de la réponse électronique des métal-oxyde aux dimensions nanos, les interactions nanomagnétiques dans les nanomatériaux, les nanocatalyseurs, la conduction électronique dans les fils moléculaires, l'auto-assemblage de films fins organiques, et les applications telles que la fabrication de composants électroniques, de composants optiques à film ultra-fin et de catalyseurs pour les piles à combustion. Le début de la construction est programmée pour octobre 2003, à côté du National Synchrotron Light Source.

Annonce presse : <http://www.bnl.gov/bnlweb/pubaf/pr/2002/doepr061402.htm>
<http://www.bnl.gov/nanocenter/>

Thèmes de recherche :

Le nanocentre va se concentrer sur six thèmes de recherche :

- les changements de la réponse électronique à l'échelle nano dans les métal – oxydes,
- les interactions magnétiques dans les nanomatériaux,
- l'étude de la structure électronique et la réactivité de nouveaux nanocatalyseurs,
- la compréhension du transport électronique dans les fils moléculaires,
- l'étude de l'auto-assemblage, et de la structure moléculaire et électronique de films fins organiques,
- les applications des nanosciences.

Les oxydes corrélés

Contact : Doon Giggs, gibbs@bnl.gov

Les recherches tenteront de définir les nouvelles règles physiques qui régissent les matériaux à l'échelle nanométrique, et étudieront la fabrication de ferroélectriques, de nanotubes de carbone, de transistors et composants basés sur les effets quantiques.

Les questions suivantes seront plus particulièrement abordées :

- quels sont les paramètres importants qui contrôlent les transports de quantum à l'échelle nano (phénomènes de cohérence, ...) ?
- quels rôles les phénomènes de confinement et d'interface jouent-ils pour déterminer le comportement à l'échelle nano ?
- quelles sont les nouvelles propriétés découlant de l'interaction entre objets nanos ?
- comment les désordres et comportements de non-équilibre se manifestent-ils dans les objets nanos ?

Ceci impliquera la fabrication et l'étude de nanostructures artificielles, et de structures nanos auto-assemblées.

Les assemblages magnétiques nanos

Contacts : : Chi-Chang Kao, kao@bnl.gov
Laura H. Lewis, lhlewis@bnl.gov

Etude des facteurs qui contrôlent les états magnétiques collectifs dans les assemblages nanos magnétiques, et étude des phénomènes qui émergent de l'interaction entre les nanoconstituants.

- Comment les interactions magnétiques se propagent-elles à l'échelle nano ?
- Quel est l'effet des différentes phases (ferromagnétique, antiferromagnétique, paramagnétique et diamagnétique) sur les interactions magnétiques ?
- Quel est le rôle du désordre chimique et de la rugosité à l'échelle atomique aux surfaces et interfaces du nanocomposant magnétique ?
- Quel est l'état de base d'un nano-assemblage magnétique ? comment les interactions magnétiques évoluent-elles alors que les dimensions du système augmentent de 1D à 3D ?
- Quelle est l'influence des anisotropies magnetocristallines aux interfaces ?
- Comment et pourquoi les directions des moments magnétiques changent à travers les interfaces ? Quelles sont les dynamiques de spin à ces interfaces ?

Les matériaux nanocatalyseurs

Contact : Mike White, mgwhite@bnl.gov

Développement de techniques de synthèse et d'outils de caractérisation des propriétés des nanoparticules à base de métal. Le but à long terme est de décrire ces propriétés au niveau microscopique et d'utiliser ces connaissances pour optimiser l'activité chimique et la sélectivité des nanoparticules, comme par exemple les nanoparticules d'argent utilisées pour l'époxydation de l'éthylène dans la production d'éthylène glycol, ou les nanoparticules platinium-ruthénium dans les piles à combustion. Des nouveaux matériaux seront aussi étudiés pour les nouvelles générations de catalyseurs.

Ceci entraîne la préparation de matrices avec des distributions de taille précises, et l'identification des corrélations entre taille, structure et réactivité chimique. Les techniques utilisées comprennent l'ablation laser et le dépôt par faisceau ionique, l'auto-assemblage sur substrat ordonné et l'incorporation dans des matériaux poreux comme les cages zéolites.

Injection et transport de charge dans les nanomatériaux

Contact : Carol Creutz, ccreutz@bnl.gov

Injection d'électrons et de trous dans des nanostructures, transport de charge dans des assemblages à 2 ou 3 dimensions, fabrication et caractérisation de nanomatériaux. Mesure des taux de transfert d'électrons entre des molécules et des contacts macroscopiques, entre des molécules et des nanoparticules, et entre les nanoparticules. La compréhension de cette conduction électrique permettra le développement de systèmes pour le stockage et la conversion d'énergie solaire, pour l'électronique et les capteurs.

Films fins organiques

Contact: Ben Ocko, ocko@bnl.gov

Compréhension des facteurs pour la stabilisation des films uniformes et d'une épaisseur nanométrique, leur organisation moléculaire, leur structure électronique et les facteurs contrôlant leur réponse. Ceci permettra le développement de revêtements pour les nanoparticules de métal ou semi-conducteur, et la création des dispositifs multi-composants avec des dimensions à l'échelle nano. La fabrication de films organiques implique généralement des basses températures et pressions, et des environnements chimiques inoffensifs en comparaison des procédés utilisés dans l'industrie des métaux et des semi-conducteurs. Le contrôle des propriétés des films fins organiques impliquera une large palette de techniques de fabrication, comme l'auto-assemblage en phase liquide, la déposition sous vide, la lithographie à rayons X ou faisceau d'électrons.

Applications des nanosciences

Contact: Richard Osgood, osgood@bnl.gov

Ces études porteront sur l'utilisation des nanosciences pour des applications dans les composants électroniques, les films optiques ultrafins, les catalyseurs pour piles à combustibles, les conducteurs moléculaires, les nanofibres, ...

Le but est d'encourager les interactions entre les physiciens et les chimistes de la science fondamentale et appliquée.

Unicité du laboratoire :

- Premier centre américain pour la science des matériaux,
- Interactions universitaires (proximité de grands centres universitaires et accueil de nombreux stagiaires),
- National Synchrotron Light Source,
- Etudes transversales à travers 5 départements scientifiques (Physique, Chimie, Sciences et Technologies pour l'énergie, Sciences pour l'environnement, Biologie/Médical).

Contexte régional :

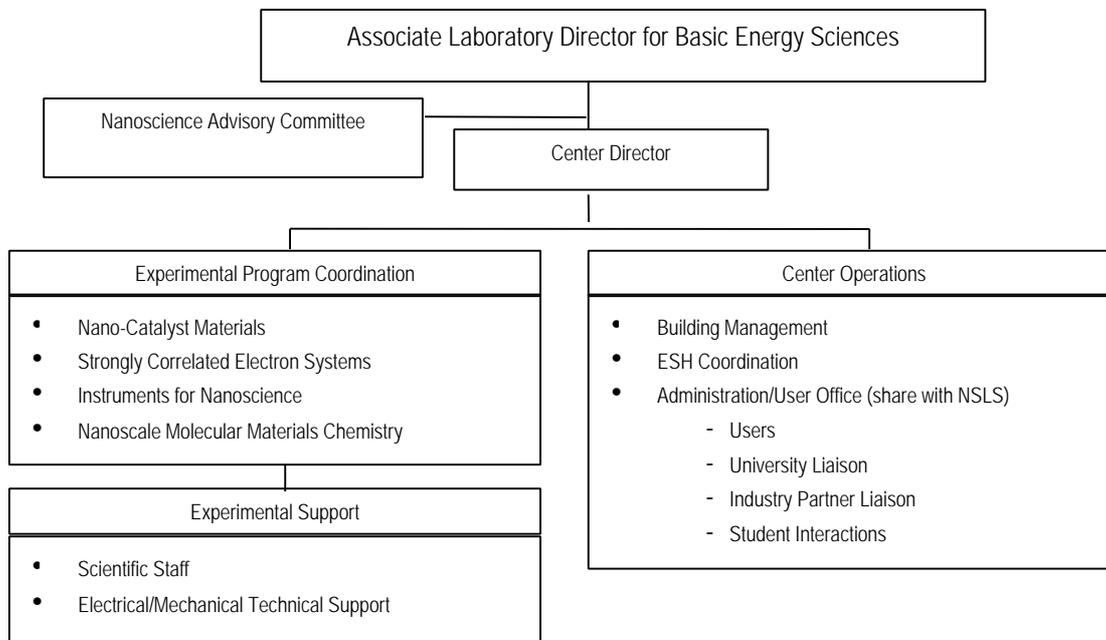
- Centre de recherche majeur sur les Matériaux dans le Nord-Est des Etats-Unis,
- Collaboration importante avec les centres de recherche universitaires et industriels régionaux,
- Partage et acquisition d'équipements grâce à des collaborations.

Compétences propres déjà existantes et acteurs associés :

- Correlated electron systems and oxide materials
 - Piezoelectric soft modes – Shirane
 - Striped phases – Emery
 - Neutron, Photoemission, x-ray scattering – Johnson, Gibbs, Kao
 - Materials, fabrication, applications – Cross, Osgood
- Molecular or soft materials
 - Electron charge transfer in molecular material – Sutin, Miller, Creutz, Newton
 - LEAF facility for charge transfer – Miller
 - X-ray scattering in soft materials – Ocko
 - Molecular devices, structure – Forrest, Flynn, Russel
- Catalysis
 - Heterogeneous – Rodriguez, Hrbek, White, Osgood, Larese
 - Homogeneous – Bullock
- Electron Microscopy – Zhu
- Microfabrication – MEMS, LIGA
- National Synchrotron Light Source
 - Hard and soft x-ray, infrared – Kao
 - Coherent measurements – Kirz

Organigramme probable du CFNM :

Tel qu'il avait été prévu lors de la réunion BESAC de février 2001



Le projet du nanocentre suppose la construction d'un nouveau bâtiment destiné aux études « nano », ainsi que l'acquisition de nouveaux équipements majeurs, tels que :

- *Nanowriter* avec un faisceau d'électrons de très haute qualité,
- TEM avec un faisceau d'électrons de très haute qualité,
- Des lignes de faisceaux spécifiques (*specialized beam lines*),
- Un laboratoire d'essai à proximité (*proximal probe laboratory*).

D'autres équipements remarquables sont déjà à proximité :

- Le National Synchrotron Light Source (NSLS, <http://www.bnl.gov/bnlweb/facilities/NSLS.html>),
- Le TEM avec un faisceau d'électrons de 300kV, InfraRouge, Ultra Violet et avec environ 75 faisceaux,
- Le Laser Electron Accelerator Facility avec un système de radiolyse à laser pulsé (<http://www.chemistry.bnl.gov/sciandtech/prc/wishart/crcrintr.html>).

Contacts (récoltés Benjamin Grenier, lors d'un entretien en août 2001)

Dr Richard OSGOOD	Directeur – Basic Energy Science
Brookhaven National Laboratory Directorate – Basic Energy Science Upton, New York 11973-5000	Mail : osgood@bnl.gov Tél. : (631) 344 3927 Fax : (631) 344 5584
John TAYLOR	Directeur Associé – Basic Energy Science
Brookhaven National Laboratory Directorate – Basic Energy Science Upton, New York 11973-5000	Mail : jtaylor@bnl.gov Tél. : (631) 344 7005 Fax : (631) 344 5584
Dr Laura LEWIS	Chercheur
Brookhaven National Laboratory Department of Applied Science Materials & Chemical Sciences Division Upton, New York 11973-5000	Mail : lhlewis@bnl.gov Tél. : (631) 344 2861 Fax : (631) 344 4071
Dr Jan HRBECK	Chercheur
Brookhaven National Laboratory Chemistry Department Upton, New York 11973-5000	Mail : hrbek@bnl.gov Tél. : (631) 344 4344 Fax : (631) 344 5815
Dr Nicholas GMUR	Chercheur
Brookhaven National Laboratory National Synchrotron Light Source Upton, New York 11973-5000	Mail : gmur@bnl.gov Tél. : (631) 344 2490 Fax : (631) 344 3029

Chercheurs impliqués

Dr Jan Hrbek (Catalyse : réactivité et structure, Département de Chimie)

<http://www.chemistry.bnl.gov/SciandTech/CRS/default.htm>

Deux sujets de recherches pour le département de chimie sur le « nano » :

- les produits catalytiques à l'échelle nanométrique pour lequel Dr Hrbek est très impliqué (auto-assemblage, réactivité, structure, optimisation)
- les nanofils (photochimie, photosynthèse artificielle (transfert de charge): applications aux biotechnologies).

Dr Nicholas GMUR, National Synchrotron Light Source (NSLS)

<http://www.bnl.gov/bnlweb/facilities/NSLS.html>

Ce synchrotron est l'un des plus utilisés au monde, et le plus utilisé aux Etats-Unis, avec environ 2 400 chercheurs accueillis par an, originaires de 380 universités, laboratoires ou industries, pour plus de 1500 expériences par an. Les recherches dispensées dans ce centre sont orientées vers la biologie (en forte progression) et la physique, la chimie et la géophysique, et la médecine et la science des matériaux (études des structures atomiques et électroniques des matériaux). Les faisceaux de lumière obtenus sont dans les longueurs d'ondes rayon-X, ultraviolet et infrarouge. Des progressions constantes depuis 1982 ont permis au SNLS de s'équiper d'un nouvel outil de recherche innovant : le laser à électrons libres, qui combine les avantages des lasers et des synchrotrons. Le NSLS est aussi en étroite collaboration avec l'European Synchrotron Radiation Facility (<http://www.esrf.fr/>).

Par ailleurs, on peut noter que les anneaux de ce synchrotron ne sont pas parfaitement circulaires, et que l'installation possède un anneau de stockage des faisceaux créés, qui sont ensuite dirigés sur deux anneaux d'études différents, dont l'un spécifique pour les rayons X.

Collaborations

Le BNL collabore actuellement déjà avec les industries, les universités, et les autres laboratoires nationaux du DoE. Mais le centre souffre apparemment de l'éloignement de centres universitaires et voudrait bien avoir le même fonctionnement qu'au Lawrence Berkeley National Laboratory, pour lequel la proximité d'une université remarquable (UC-Berkeley) assure au centre une compétence intellectuelle unique. Ils comptent donc beaucoup sur le partenariat avec l'Université de Stony Brook (SUNY), avec laquelle il possède déjà quelques projets communs.

Le laboratoire national de Long Island est donc ouvert à toute proposition de partenariat/collaboration, et plus encore avec l'ouverture d'un centre national pour les Nanotechnologies. Pour ce projet, le BNL espère un partenariat avec les universités de Stony Brook, Columbia, et Princeton, plus des collaborations avec celles de Yale, MIT, Cornell, Harvard, voire même Massachussets, Connecticut, et Rutgers Universities.

Les collaborations avec les autres NRSEC du DoE (Los Alamos/Sandia, Lawrence Berkeley, Oak Ridge, Argonne), l'industrie, et les universités, ainsi que les collaborations internationales sont donc au premier plan des objectifs du BNL.

CENTER FOR NANOSCALE MATERIALS, ARGONNE NATIONAL LABORATORY

Présentation du futur Nanocentre lors de la réunion BESAC (février 2001) :
<http://www.sc.doe.gov/production/bes/BESAC/NanoANL.ppt> .

Introduction

Premier centre du DoE en 1946 et descendant du laboratoire métallurgique de l'université de Chicago, l'ANL (<http://www.anl.gov/>) faisait aussi partie du projet Manhattan (arme nucléaire). Après la seconde guerre mondiale, les objectifs de ce centre ont été orientés vers le développement des réacteurs nucléaires pour leur utilisation dans le domaine public. Avec le temps, la gamme des études s'est aussi considérablement élargie. Aujourd'hui Argonne est géré par l'Université de Chicago pour le DoE.

La recherche à Argonne (<http://www.anl.gov/OPA/progs.htm#sf>) est répartie en quatre thèmes :

- Les Sciences Fondamentales : expériences et théorie autour des thèmes suivants
=> science des matériaux, physique, chimie, biologie, physique des hautes énergies, mathématique, informatique (supercalculs).
- Les Equipements Scientifiques (*Facilities*) : nombreuses installations utilisées par la communauté scientifique américaine publique ou privée (voire internationale), dont :
 - o Advanced Photon Source, APS <http://www.aps.anl.gov/aps.php>,
 - o Intense Pulsed Neutron Source, IPNS <http://www.pns.anl.gov/>,
 - o Argonne Tandem Linear Accelerator System, ATLAS
<http://www.phy.anl.gov/atlas/index.html>.
- Les Ressources Energétiques : études d'énergies efficaces et propres (batteries, piles à combustibles, nouveaux systèmes de stockage et générateurs de puissance électrique, en plus du contrôle et de la sécurité des réacteurs nucléaires).
- La Gestion de l'Environnement : énergies alternatives, risques environnementaux et évaluation des impacts économiques, analyses de sites pollués et plans de restauration, traitement électro-métallurgique pour préparer le retraitement des combustibles nucléaires utilisés, nouvelles technologies pour la décontamination et le retrait des réacteurs nucléaires.

Le centre emploie environ 4000 personnes, dont 1400 scientifiques et ingénieurs (dont 700 docteurs). Le budget annuel du centre est de \$475 millions, qui financent 200 projets de recherche. Depuis 1990, Argonne travaille avec plus de 600 entreprises et plusieurs agences fédérales et autres organisations.

Deux sites composent ce laboratoire national :

- Site Illinois (Argonne, IL) : 3200 employés, 600 ha,
- Site de Argonne-West (Idaho Falls, ID) : 800 employés, 360 (<http://www.anlw.anl.gov/>).

Ce centre a aussi mis l'accent sur le partenariat avec :

- L'industrie : transferts de technologie et collaborations,
- Les universités : formation.

Projet du Center for Nanoscale Materials

Proposé par l'ANL au début de l'année 2001, le Center for Nanoscale Materials (CNM) n'a pas été retenu lors du choix final : réunion BESAC en août 2001. A l'image du NSRC de Brookhaven, on pourrait toutefois voir sa création concrète d'ici quelques années. Voici donc ci-dessous les grandes lignes de ce nanocentre :

Recherche & Développement :

Le CNM s'appuiera sur des compétences déjà existantes à l'ANL, dont voici une liste détaillée et non exhaustive des sujets concernés :

- Nanomagnétisme : magnétisme (disques durs, moteurs, échanges dans les réseaux), industrie du stockage magnétique (\$150G/an).
=> Exemples de sujets : îlots elliptique de nickel, imagerie MFM de domaines magnétiques simple, aimants sous forme de ressort, matériau et synthèse (lithographie, auto-assemblage, aimants moléculaires).
- Supraconductivité à l'échelle nanométrique (NbSe₂, Nb, association avec le magnétisme)
- MEMS comme support nano de laboratoire (magnétomètre, diamant ultra-nanocristallin, NEMS, etc.)
=> applications en microscopie électronique in-situ (magnétisme, champs électrique, nanomécanique).
- Couches minces et points ferroélectriques (stockage à haute-densité – solutions nanométriques)
- Compréhension nécessaire de la synthèse soustractive et additive (croissance),
- Etude de nouveaux matériaux comme les oxydes à constituants multiples.
- Etudes à résolution temporelle de commutateurs ferroélectriques
- Exploitation unique de TiO₂, photochimie d'ADN (in vivo : nano-robotique, in vitro : nano-puces)
- Nanofabrication : ions de corps, lissage de surface, forte réactivité chimique, sublimation simple et ionique
- Instrumentation :
 - o Microscopie électronique de matériaux nanostructurés
 - o Microscopie optique à balayage en champ proche
 - o Nanosondes rayons-X avec diffraction contrastée (diffraction contrast X-ray nanoprobe experiments) : études de nanostructures individuelles
 - o Microsondes rayons-X (physique à l'échelle nanométrique dans les ferroélectriques, magnétisation dans HoFe₂, contrainte sous métallisation du silicium)
 - o Caractérisation Rayon-X en temps réel de croissance à motif,
 - o Microscopie par fluorescence Rayon-X, complémentaire à la microscopie électronique par transmission
- Nanotechnologies : transport, environnement, énergie
=> besoin d'infrastructures adéquates pour la fabrication et la caractérisation.

Contexte Régional :

De nombreuses universités de renom sont à proximité de l'ANL :

- Northwestern University (<http://www.northwestern.edu/>),
 - o Institute for Nanotechnology: <http://www.nanofabrication.northwestern.edu/breakingnews.htm>
 - o Materials Research Center (MRSEC): <http://mrcemis.ms.northwestern.edu/main.html>
- The University of Chicago (<http://www.uchicago.edu/>)
=> MRSEC, <http://jfi.uchicago.edu/MRSEC/>
- Northern Illinois University (<http://www.niu.edu/>),
- L'University of Illinois à Chicago (<http://www.uic.edu/>),
- University of Illinois at Urbana-Champaign (<http://www.uiuc.edu/>).

Le domaine des nanotechnologies est très actif dans l'état de l'Illinois, comme le montre la création d'un Institut à l'université de Northwestern sur les nanotechnologies, l'organisation de la Fine, Ultrafine and Nanoparticles 2001 (14-17 Octobre 2001, <http://bccresearch.com/nano2001/>) et de la rencontre Franco-américaine autour des Nanoparticles in Materials Science à Northwestern University (3-5 Décembre 2001, <http://www.matsci.northwestern.edu/>).

Contexte National :

- Installations uniques de nanosondes à l'Advanced Photon Source (APS, <http://www.aps.anl.gov>), dont Murray Gibson est l'actuel directeur associé. Le nouveau directeur reste aussi très impliqué dans le projet du CNM, étant à l'origine de ce projet.
- Développement de la nouvelle microscopie électronique, de l'instrumentation de microscopie de sondage (collaboration avec les autres NSRCs)
- Compétences pour les matériaux inorganiques
- Collaborations à travers les Etats-Unis

Organisation :

Le CNM compterait sur un partenariat universitaire très actif :

- Personnel : 30 chercheurs et 60 étudiants de niveaux d'études supérieures sur le site de l'ANL (dont 15 de ces étudiants seraient co-financés par le DoE (\$675k par an), plus des aides pour des thèses (\$150k par an))
- Financement de programmes,
- Formation : nouvelles techniques liées aux nanosciences, école de nanotechnologies
- Laboratoires satellites – réseau nano.

Le CNM nécessitera des infrastructures supplémentaires pour développer sa R&D (Fabrication / Caractérisation / Simulation) :

- Nanofabrication : faisceau d'électrons, faisceau d'ions, faisceau à dispersion, rayon-X, formation de dépôts, procédés,
- Nouvelle microscopie électronique,
- Microscopie d'analyse par balayage,
- Assemblage moléculaire et auto-assemblage,
- Spectroscopies dynamiques d'échelle nanométrique (optique, magnétisme, paramagnétisme),
- Nouvelles analyses de données et simulations.

Certains scientifiques américains (et étrangers) ont été surpris de ne pas voir le projet CNMS de l'ANL choisi par le BESAC, parmi les cinq propositions de NSRCs. Les responsables du projet, qui se sont appuyés sur des arguments régionaux, n'ont vraisemblablement pas répondu aux attentes du BESAC avec une ouverture nationale du futur nanocentre, même si à l'origine les projets devaient rester régionaux. On peut quand-même avoir bon espoir de voir l'ouverture d'ici quelques années du CNMS, étant donné les nombreuses recherches en nanoscience des scientifiques de ce laboratoire.

Contacts (obtenus par Benjamin Grenier)

Murray Gibson	Directeur associé de l'Advanced Photon Source (APS, www.aps.anl.gov)
(Ancien Directeur, Materials Science Division http://www.msdl.anl.gov/) Argonne National Laboratory, ANL, http://www.anl.gov/ Argonne, IL	Mail : gibson@anl.gov Tél. : 630-252-7990 Fax : 630-252-4599
Samuel D. Bader	Responsable du projet Center for Nanoscale Materials
Magnetics films Argonne National Laboratory, ANL, http://www.anl.gov/ Argonne, IL	Mail : bader@anl.gov Tél. : 630-252- 4960 Fax : 630-252- 9595
Jeffrey Eastman	Chercheur
Materials Science Division, http://www.msdl.anl.gov/ Argonne National Laboratory, ANL, http://www.anl.gov/ Argonne, IL	Mail : jeastman@anl.gov Tél. : 630-252- 5141 Fax : 630-252- 4289
Dongqi Li	Physicienne
Materials Science Division, http://www.msdl.anl.gov/ Argonne National Laboratory, ANL, http://www.anl.gov/ Argonne, IL	Mail : dongqi@anl.gov Tél. : 630-252-5650 Fax : 630-252-9595