

Empa **News**

Le périodique clients et grand public de l'Empa
8^e année / numéro 29 / mai 2010



Grande puissance de calcul pour les simulations complexes 14

EMPA 
Materials Science & Technology

Un lanceur de projets de recherche 04

Nouvelles applications grâce à la biocatalyse 08

Des experts de l'Empa fort demandés 12

Recherche *in silico*

Comment – du moins dans les sciences physiques et naturelles et dans les sciences de l'ingénieur – naissent les connaissances scientifiques nouvelles? Souvent par l'observation de cet «objet du désir», vient ensuite l'élaboration d'une théorie et finalement sa vérification expérimentale.

Nombre de phénomènes dont s'occupent les chercheurs ne se laissent pas facilement reproduire expérimentalement. Comment voulez-vous, par exemple, reproduire le climat en laboratoire? Ou des écosystèmes entiers. Ou encore prédire comment un phénomène – tel qu'un nuage de poussière volcanique – va évoluer dans les jours à venir?



Pour répondre aux questions de ce genre, on fait appel aux ordinateurs de grande puissance et à la modélisation, autrement dit à la simulation sur ordinateur. In silico, les chercheurs ne connaissent plus de limites et, suivant la puissance de calcul disponible, ils peuvent calculer de nom-

breux scénarios différents. A l'Empa ce travail est assumé par une collaboratrice infatigable, la ferme de calcul «Ipazia» qui est actuellement agrandie pour pouvoir procéder à des calculs encore plus exigeants.

Ipazia est infatigable et hautement interdisciplinaire; elle travaille presque jour et nuit et fournit des réponses à des questions telles que: Pourquoi certaines molécules s'organisent-elles spontanément sur des surfaces pour former des nanostructures? Comment les polluants se propagent dans l'atmosphère à partir d'une source ponctuelle, ou le bruit dans l'environnement? Comment se comportent dans différentes conditions les hydrures complexes utilisés pour le stockage de l'hydrogène?

Faites connaissance avec Ipazia, nous vous la présentons sous la rubrique «Focus» de ce numéro des EmpaNews.

Michael Hagmann

Responsable de la communication



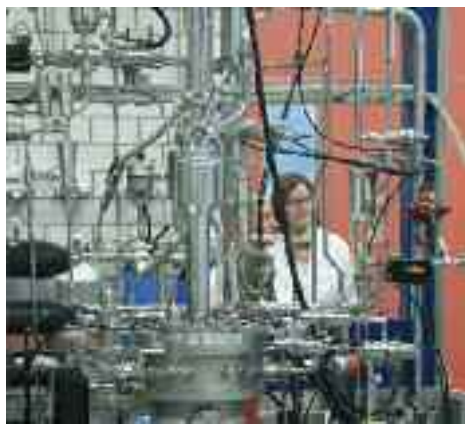
De la curiosité à la recherche
Un lanceur de projets de
recherche 04



Page de titre

Les simulations sur ordinateur sont devenues indissociables des sciences modernes.

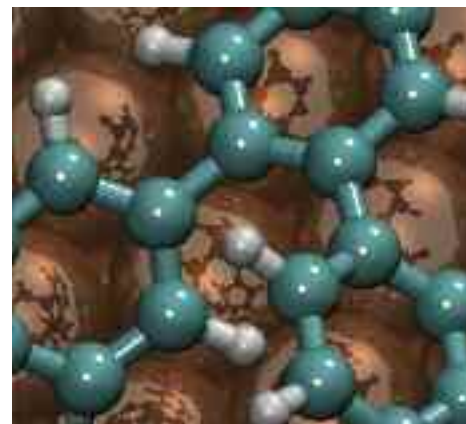
Sur leur ferme de calcul Ipazia, les chercheurs de l'Empa procèdent à des simulations pour les projets les plus divers, par exemple sur le bruit des chemins de fer, le transport des polluants dans l'atmosphère, le comportement des piles à combustible au niveau atomique ou encore l'auto-organisation des nanostructures sur les surfaces. (Photo: Empa)



Des gènes aux produits
Nouvelles applications grâce
à la biocatalyse 08



De la corrosion aux dommages
Des experts de l'Empa fort
demandés 12



Du bruit et des nanoparticules
Grande puissance de calcul pour
les simulations complexes 14

Impressum

Editeur
Empa
Überlandstrasse 129
CH-8600 Dübendorf
www.empa.ch


**Rédaction, lectorat,
maquette, impression**
Section Communication

Rédaction
Téléphone +41 44 823 47 33
empanews@empa.ch
www.empanews.ch

Parution trimestrielle

ISSN 1662-6532

- Recherche et développement
04 **Un générateur d'idées**
- Recherche et développement
06 **Unique en son genre – le nouveau centre laser de l'Empa**
- Recherche et développement
07 **Des oursins synthétiques capteurs de lumière**
- Recherche et développement
08 **La biocatalyse, une face «verte» de la chimie**
- Focus: Science des matériaux et simulations**
- 10 **Sans cesse à calculer**
- 13 **La puissance de calcul pour lutter contre le bruit**
- 14 **«Et maintenant les prévisions d'ozone pour demain ... »**
- 16 **Les comptes des mille et un atomes**
- Recherche et développement
18 **Sur la trace des microfissures**
- Essais et services
20 **La corrosion par le chlore cause de l'effondrement
du plafond d'une piscine**
- La science en dialogue
22 **Des salissures qui améliorent les diodes**
- La science en dialogue
23 **L'azote – un toxique**
- La science en dialogue
23 **«Rent-an-academy»**
- 24 **Manifestations**



«Je suis un constructeur de tremplin pour des projets de recherche qui lancent des ponts vers l'industrie.»

Un générateur d'idées

Patrik Hoffmann est fasciné par ce qui est complexe. «Plus un problème est difficile, plus cela me rend curieux» c'est ainsi qu'il décrit sa soif de savoir. Cette soif, ce spécialiste des surfaces micro- et nanostructurées et de l'usinage par laser et micro-ondes, l'étanche depuis avril 2009 à l'Empa en tant que chef du laboratoire «Advanced Materials Processing».

TEXTE: Martina Peter / PHOTO: Ruedi Keller

«Ca va?», lance amicalement Patrik Hoffmann à un collaborateur alors qu'il se trouve en marche vers son bureau, puis il se renseigne en passant auprès d'une collègue si l'heure du rendez-vous prévu l'après-midi lui convient et il informe encore en vitesse par téléphone un de ses chefs de projet de l'état d'avancement d'un projet industriel. Hoffmann communique à plein régime – vivant, attentif, précis, en passant avec aisance de l'allemand au français ou à l'anglais.

Ce nouveau chef du laboratoire «Advanced Materials Processing» posséderait-il un talent inné pour les langues? «Je n'ai pas grandi dans un milieu bilingue et à l'école mes notes en langues étrangères n'étaient pas particulièrement brillantes», explique Hoffmann qui est né dans la Rhénanie-Palatinat et a étudié la chimie à Karlsruhe. Lorsqu'il va à Lausanne passer une thèse à l'EPFL, il ne sait même pas commander une bière en français. «Ce qui était particulièrement dur pour moi», déclare-t-il dans un sourire. «Je me sens de toute façon toujours mal dans ma peau lorsque je ne peux pas communiquer.» Mais Hoffmann n'est pas homme à se résigner si vite. La ténacité avec laquelle il a résolu son «problème linguistique», on la retrouve aussi dans sa manière d'aborder les problèmes scientifiques complexes. «Plus une problème est ardu, plus cela me rend curieux.»

Poursuivre une bonne idée par mois

Cette ténacité Hoffmann en a aussi fait preuve lorsqu'il était post-doc au centre de recherche IBM d'Almaden à San José en Californie. A la fin 1992, la situation économique n'étant pas bonne, IBM décida de geler tous les postes de post-doc et donc aussi celui de Hoffmann. «J'aurais eu alors la possibilité de me faire engager dans une entreprise californienne qui vendait des stores en aluminium en Allemagne.» Mais cela ne correspondait pas à ses idées – et des idées il n'en manquait pas non plus pour des projets de recherche passionnants. «En fait chaque jour de nouvelles idées me viennent à l'esprit dont à peu près une par semaine résiste à la critique. A la fin du mois j'essaie d'en poursuivre au moins une.» Ce sont deux idées issues de son imagination qu'il a alors soumises à IBM – et l'une d'elles lui valut de décrocher la timbale. IBM l'engagea pour un projet de développement de couches monomoléculaires destinées, entre autres, à protéger les coques des navires contre l'infestation par les moules et autres organismes marins.

Parfois ce sont d'autres qui traduisent dans les faits les idées de Hoffmann. C'est ce qui s'est passé avec son travail le plus fréquemment cité datant de 1995. Ce travail traitait de l'utilisation des fibres de verre pour un microscope à champ proche particulier, le SNOM («scanning near-field optical microscope»), qui est en quelque sorte la variante optique d'un microscope à sonde locale. Sur le SNOM, une minuscule source de lumière balaye à quelques nanomètres de distance la surface de l'échantillon à examiner. Pour obtenir des résultats optimaux, il faut que la pointe de fibre de verre servant de source lumineuse du SNOM soit aussi fine que possible. Au lieu de chauffer une fibre de verre pour l'étirer et obtenir ainsi une pointe comme on le faisait jusqu'ici, Hoffmann a développé un procédé d'attaque chimique qui taille la fibre en pointe un peu à la manière d'un taille crayon. C'est avec des pointes réalisées par ce procédé que par la suite d'autres chercheurs ont obtenu des résultats qui firent sensation: une équipe de l'EPF de Zurich, par exemple, a utilisé la technologie «de pointe» de Hoffmann pour la spectroscopie Raman haute résolution. Elle fut ainsi la première au monde à réaliser une analyse spectroscopique avec un rayon lumineux 10000 fois plus intense que jusqu'ici et à identifier des molécules avec une résolution latérale nettement inférieure à la longueur d'onde de la lumière.

Des exigences de qualité élevées

Malheureusement de nos jours les idées «solides» se font de plus en plus rares dans les publications, comme le critique Hoffmann; il n'incite pas seulement ses doctorants de l'EPF de Lausanne à accorder beaucoup de soin à la réalisation de leurs essais, il exige aussi de ses collaborateurs à l'Empa une évaluation critique et une interprétation prudente de leurs résultats et de ne publier que ce qui résiste vraiment à l'analyse. La tactique du salami pour accroître artificiellement le nombre des publications lui fait horreur. «C'est aussi la raison pour laquelle les publications scientifiques n'ont pas très bonne réputation dans l'industrie», comme le sait Hoffmann depuis son temps passé dans celle-ci.

Hoffmann n'a aucun scrupule à formuler clairement ses exigences. «J'ai beaucoup appris des avocats» explique-t-il. «Ils ont l'habitude de défendre leur point de vue jusqu'à l'outrance. Et malgré cela, deux avocats «adverses» peuvent très bien se retrouver autour d'une bonne bière après leurs plaidoiries». On peut très bien s'imaginer que Hoffmann y parvient lui aussi lorsqu'on le voit prendre son lunch au milieu de ses jeunes chercheurs et participer de manière intéressée et en toute impartialité à leurs discussions.

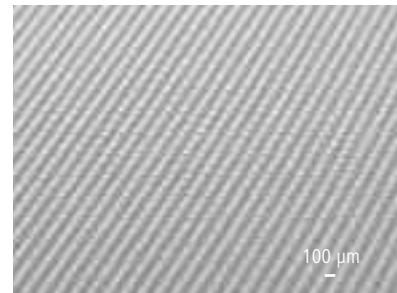
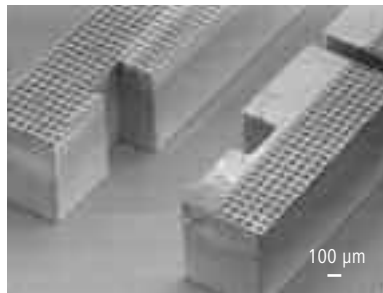
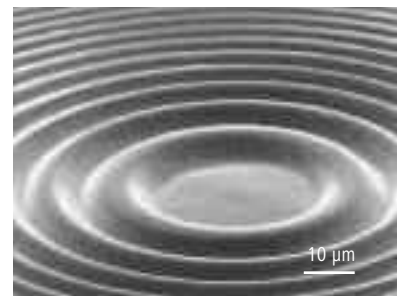
Puissance dynamique dans la continuité

«Petit et dynamique» c'est ainsi que Hoffmann se représente le groupe de recherche idéal. Il doit comprendre des chercheurs et des techniciens expérimentés collaborant avec des post-docs et des doctorants qui apportent régulièrement des idées nouvelles. Car Hoffmann s'enthousiasme aussi volontiers pour les idées des autres. Et aussi dans le domaine privé, comme par exemple pour le mouvement «Movember», un mode de collecte de fonds en Australie où chaque année au mois de novembre des hommes se laissent pousser la moustache pour réunir des fonds en faveur de la recherche sur le cancer de la prostate et de sa prévention ainsi que pour d'autres problèmes de santé spécifiques des hommes. «L'apparence singulière que me donne mon ornement pileux hirsute actuel me fournit sans cesse l'occasion d'attirer l'attention sur cette idée. Et je le fais volontiers.»

Faire passer avec succès ses idées dans la pratique, c'est ce qu'offre l'Empa depuis le mois d'avril 2009 à Hoffmann. Il définit son rôle comme étant celui d'un constructeur de tremplin pour des projets de recherche qui lancent des ponts vers l'industrie. Hoffmann considère qu'il existe un potentiel de collaboration important avec l'industrie dans le domaine des interactions entre les matériaux et les micro-ondes. Il est en effet étonnant que, bien que la technique des micro-ondes soit connue depuis environ 50 ans et qu'on trouve des fours à micro-ondes dans presque chaque ménage, on sache encore très peu de choses sur la manière dont interagissent les champs électromagnétiques des micro-ondes avec les différents matériaux.

C'est aussi pourquoi un consortium de recherche sur les micro-ondes devrait être créé à l'Empa à Thoune où des partenaires de la recherche et de l'industrie apporteront leur savoir respectif sur les interactions entre matériaux et micro-ondes. Le rêve de Hoffmann: parvenir à convaincre les partenaires d'alimenter ce pool de données de manière transparente et ouverte. Une entreprise qui n'a rien d'aisé car souvent les entreprises désirent garder sous clé leurs résultats. Un projet tout à fait au goût de Hoffmann – plus c'est ardu, plus c'est intéressant. //

La nouvelle installation laser de Thoune permet de microstructurer des surfaces. Dans le sens des aiguilles d'une montre à partir d'en haut à gauche: la topographie de la Suisse à l'échelle 1:10⁹ (1 km → 1 μm); structure comportant des lentilles de Fresnel; microlentilles sur un composant; grille de microlentilles de grande surface. (Photo: Karl Boehlen)



Unique en son genre – le centre laser de l'Empa

Une nouvelle installation de l'Empa permettra d'ici l'été de microstructurer des grandes surfaces à l'aide d'un laser ultraviolet pulsé. Ce traitement confère aux matériaux – tels que des feuilles de polymère mais aussi éventuellement des feuilles céramiques encore à développer – des propriétés physico-mécaniques nouvelles.

TEXTE: Martina Peter

Cet été une nouvelle installation laser va être mise en service à l'Empa à Thoune. Cette installation, dont il n'existait jusqu'ici que deux exemplaires au monde, utilise le rayonnement d'un laser ultraviolet pulsé pour arracher avec précision des couches d'une épaisseur de l'ordre du nanomètre sur des surfaces pouvant atteindre jusqu'à quatre mètres carrés. Cette microstructuration leur confère de nouvelles propriétés physico-mécaniques telles que diminution du frottement, réduction de la résistance à l'écoulement de l'air ou encore inhibition de la croissance des algues et champignons. Elle permet aussi de «préparer la voie» pour des processus électrochimiques et de réaliser des circuits ou des contacts électriques sur des écrans ou de piles solaires flexibles. L'usinage laser de grandes surfaces peut encore servir à la réalisation d'outils de moulage pour la fabrication «au mètre» et à faibles coûts de feuilles structurées. Elle permet aussi de produire des feuilles comportant des marques de sécurité: aujourd'hui déjà certains pays s'efforcent de remplacer sur leurs billets de banque les hologrammes par des feuilles microstructurées produisant des effets optiques tridimensionnels.

Important aussi pour la recherche

La recherche elle aussi profitera tout autant que l'industrie de cette nouvelle installation: «Nous désirons connaître quels sont les matériaux qui, mis à part les polymères, sont adaptés à une microstructuration», explique Patrik Hoffmann, le chef du laboratoire «Advanced Materials Processing» qui abritera cette installation. A cet égard, les céramiques dites vertes, non frittées, semblent très intéressantes. Ceci permettrait par exemple de remplacer les feuilles polymères par des feuilles céramiques minces, flexibles et beaucoup plus durables, utilisables comme membranes pour la séparation et la purification des liquides et des gaz. Les structures optiques actives sont plus exigeantes car elles doivent pouvoir résister à la chaleur. De telles couches «intelligentes» pourraient servir de capteurs de grande surface pour la température, la pression ou de détecteurs de substance chimique. «La première branche de l'industrie à en profiter sera l'industrie aéronautique et spatiale», estime Hoffmann. //

Des oursins synthétiques capteurs de lumière



A l'aide d'un procédé électrochimique simple, des chercheurs de l'Empa sont parvenus à produire, à partir de minuscules sphères de polystyrène, des «oursins» dont les piquants sont formés de nanofils d'oxyde de zinc. Cette nanostructuration devrait permettre d'accroître l'efficacité d'applications photovoltaïques.

TEXTE: Martina Peter / PHOTO: Empa

Les procédés qui confèrent aux matériaux des propriétés nouvelles sont en général compliqués et donc difficilement reproductibles. Il y a ainsi de quoi s'étonner lorsque des scientifiques développent de nouvelles méthodes qui fournissent d'excellents résultats et cela avec des matériaux de base bon marché et sans appareillage coûteux.

Un simple squelette de polystyrène

C'est exactement ce à quoi sont parvenus Jamil Elias et Laetitia Philippe du laboratoire «Matériaux et nanomécanique» de l'Empa à Thoune: ils utilisent de minuscules sphères de polystyrène pour créer sur des surfaces des structures tridimensionnelles de nanofils d'oxyde de zinc semi-conducteurs. Elias en est persuadé: «Ces surfaces d'une «rugosité» régulière se prêtent à de nombreuses applications en électronique et en opto-électronique, par exemple pour produire des piles solaires, mais aussi des laser à courte longueur d'onde, des diodes luminescentes et des écrans à émission de champ.»

Le monde scientifique a promptement réagi: la publication de ces deux chercheurs parue on-line en janvier 2010 dans la revue scientifique «Advanced Materials», comptait déjà le mois de sa parution parmi les articles le plus téléchargés et a été choisie comme deuxième page de titre de son numéro d'avril.

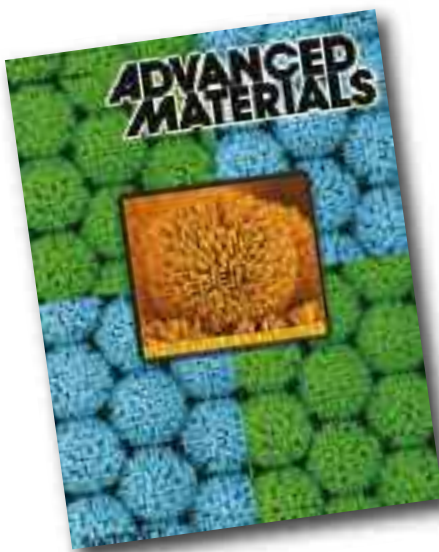
Le principe de ce procédé est très simple: de minuscules sphères de polystyrène d'un diamètre de quelques micromètres seulement sont placées sur une surface électroconductrice où elles s'ordonnent pour former des motifs réguliers. Le polystyrène est un matériau bon marché et omniprésent; on s'en sert pour

produire des emballages tels que les gobelets de yoghurt ou dans sa variante expansée – plus connue sous les noms de marque Styropore ou Sagex – par exemple aussi des panneaux d'isolation thermique.

Des corps creux munis de «piquants» pour la photovoltaïque

Les microsphères de polystyrène ainsi fixées forment l'ossature sur laquelle vont croître des nanofils. Avec un procédé électrochimique développé à cet effet, Jamil Elias est parvenu à faire varier la conductibilité électrique et les propriétés électrolytiques des microsphères de manière à ce que l'oxyde de zinc se dépose sur leur surface pour former des nanofils réguliers. Une fois les «piquants» formés, le polystyrène est détruit et il ne reste que des sphères creuses qui ont l'aspect d'oursins. Agencés de manière compacte sur la surface où ils sont fixés, ces «oursins» forment un revêtement tridimensionnel qui possède une très grande surface spécifique.

Ces surfaces nanostructurées se prêtent avant tout à des applications en photovoltaïque. Laetitia Philippe, qui dirige le groupe «Electrochimie» explique: «Nous nous attendons à ce que ces surfaces présentent d'excellentes propriétés de diffusion de la lumière et absorbent ainsi nettement mieux la lumière du soleil et transforment ainsi plus efficacement l'énergie de rayonnement en électricité.» Avec son équipe elle développe, dans un projet financé par l'Office fédéral de l'énergie (OFEN), des absorbeurs ultraminces (Extreme Thin Absorber, ETA) à base de nanostructures d'oxyde de zinc pour les piles solaires. //



Bibliographie:

J. Elias, C. Lévy-Clément, M. Bechelany, J. Michler, G.-Y. Wang, Z. Wang, L. Philippe: Hollow Urchin-like ZnO thin Films by Electrochemical Deposition, *Advanced Materials*, Volume 22, Issue 14, Pages 1607-1612 (April 12, 2010)

<http://www3.interscience.wiley.com/journal/123240975/abstract>

La biocatalyse, une face «verte»

Produire sélectivement, en toute sécurité et écologiquement des molécules et des matériaux bien déterminés, c'est ce dont sont capables les enzymes. Les chercheurs de l'Empa étudient ces biomolécules et les testent pour de nouvelles applications – et cela en particulier aussi pour l'industrie.

TEXTE: Beatrice Huber

1
Des gènes aux produits: grâce à son équipe interdisciplinaire de chimistes, des biologistes et de biotechnologues et à son expertise dans la conduite des bioréacteurs, l'Empa est en mesure de procéder à des biocatalyse aussi bien à l'échelle du laboratoire qu'à l'échelle pilote et franchit ainsi un grand pas vers la satisfaction des besoins de l'industrie. (Photo: un bioréacteur de l'Empa)

L'azote moléculaire – en abrégé N₂ – est stable. Très stable. Une pression de 450 bar et une température de 500 degrés Celsius sont nécessaires dans le procédé industriel Haber-Bosch pour briser la triple liaison entre les deux atomes d'azote et permettre ainsi d'utiliser l'azote atomique pour des synthèses – par exemple pour la production d'engrais. Mais cela peut se faire aussi plus élégamment: des microorganismes présents dans les sols sont capables de «fixer» l'azote à pression normale et à une température d'environ 10 degrés à l'aide d'enzymes.

Des biocatalyseurs pour des réactions très spécifiques

Les enzymes sont des catalyseurs qui accélèrent de manière unique et «douce» des réactions chimiques. Ce sont des biopolymères composés essentiellement d'acides aminés, et donc de la matière, mais de la matière qui possède un contenu d'information chimique élevé. Très souvent les réactions qu'elles stimulent présentent une chiralité, régio et stéréosélectivité élevées. Les enzymes peuvent se produire facilement à partir de matières premières bon marché et renouvelables à l'aide de microorganismes et elles sont tout aussi aisément dégradables. Elles présentent ainsi – et aussi du fait de leurs mécanismes de catalyse raffinés – des avantages économiques et écologiques: souvent les quantités d'énergie et de matière première sont moins importantes et les quantités de déchets et de produits secondaires plus faibles. Les conditions de réaction permettent un déroulement sûr du procédé en permettant d'éviter par exemple des températures ou des pressions extrêmes, ce qui réduit les risques.

Les réactions enzymatiques sont de plus normalement facilement scalables, autrement dit le passage de l'échelle du laboratoire à l'échelle industrielle est relativement simple. Avec tous ces avantages, rien d'étonnant que l'industrie chimique s'intéresse fortement aux applications biocatalytiques. Ainsi une partie importante de la molécule de l'atorvastatin, le principe actif de médicaments qui inhibent la biosynthèse du cholestérol, est produite par voie enzymatique.

A la conquête de nouvelles applications

La biocatalyse permet de produire aussi bien de petites molécules que des matériaux. Et c'est ce à quoi travaille entre autres depuis bien deux ans déjà le groupe Biocatalyse de l'Empa sous la direction de Linda Thöny-Meyer et de Michael Richter. «La nature recèle encore nombre d'enzymes pour des réactions incon-



» de la chimie

2

Un des projets de recherche de l'équipe de l'Empa porte sur les tyrosinases. Ces enzymes sont décisives pour la production du pigment noir qu'est la mélanine qui procure à la peau humaine une certaine protection contre les rayons ultraviolets.

A côté de la tyrosine, les tyrosinases peuvent aussi transformer d'autres substrats phénoliques. L'équipe de l'Empa étudie de nouvelles tyrosinases pour des applications biotechnologiques. (Formule structurale de *Streptomyces tyrosinase* (pdb 1WX2): Y. Matoba et al. (J. Biol. Chem. 2006, 281(13), 8981–8990) et Michael Fairhead, Empa; photo: iStock)

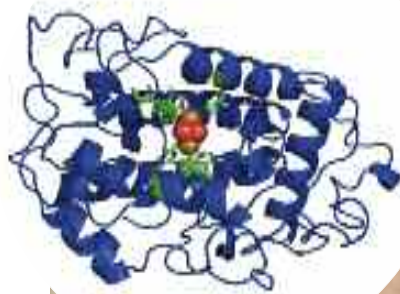
nues jusqu'ici» explique Richter. «Et inversement, nous sommes encore loin de disposer des enzymes appropriés pour chaque réaction.»

Cette équipe de l'Empa étudie diverses enzymes. Par exemple les tyrosinases. Ces enzymes sont décisives pour la production du pigment noir qu'est la mélanine à partir de l'acide aminé tyrosine. A côté de la tyrosine, elles peuvent encore transformer d'autres substrats phénoliques. Cette équipe clone, caractérise et produit de nouvelles tyrosinases pour des applications biotechnologiques, par exemple pour la décomposition de polluants, la réticulation de protéines ou la production de mélanine.

Elle s'intéresse aussi aux enzymes dépendantes de la thiamine diphosphate – la thiamine est plus connue sous le nom de vitamine B1. Ces enzymes catalysent diverses réactions dans lesquelles il se forme par exemple des liaisons entre atomes de carbone et qui conduisent à la formation préférentielle d'un des stéréo-isomères d'une molécule, ce qui permet de synthétiser des précurseurs de substances importantes.

Les chercheurs de l'Empa désirent aussi développer de nouvelles enzymes qui catalysent des réactions jusqu'ici difficiles, voire même «impossibles» réaliser. «La biocatalyse est un complément très précieux des méthodes de synthèse conventionnelles et elle ouvre une page nouvelle et fascinante de la chimie», déclare Richter.

Ce qui rend les travaux de l'Empa particulièrement intéressants pour ses partenaires industriels potentiels. Grâce à une équipe interdisciplinaire de chimistes, de biologistes et de biotechnologues – configuration rare dans les autres institutions de recherche de son genre – l'Empa est dans une situation très confortable sur la voie qui conduit des gènes jusqu'aux produits obtenus par biocatalyse. Un grand pas vers la satisfaction des besoins de l'industrie. //



2



Journées de la génétique 2010: Schnuppern an der Empa

Cette année à nouveau les Journées de la génétique lancent une invitation à se plonger dans l'univers des biosciences. Le 1 juin de 13.00 à 18.00 heures, l'Empa organise une visite ses laboratoires. Informations sur le programme général de ces journées et inscriptions sous www.gentage.ch

Sans cesse à calculer

La simulation sur ordinateur est devenue un outil indispensable de la science moderne. Sur la ferme de calcul Ipazia, dont l'extension est en cours, les chercheurs de l'Empa simulent par exemple comment se propage le bruit provoqué par les trains ou ce qui se passe exactement dans une pile à combustible.

TEXTE: Beatrice Huber

La ferme de calcul Ipazia offre la puissance nécessaire pour les simulations de nombreux projets et est très demandée. (Photo: Ruedi Keller)

C'est dans une cave fermée par deux portes que se trouve Ipazia, la collaboratrice certainement la plus zélée de l'Empa. Cette ferme de calcul ne fait pas de pause, ne prend jamais de vacances et travaille jour et nuit avec fiabilité. Mais ce n'est pas uniquement sa fiabilité qui rend Ipazia aussi appréciée auprès de ses collègues humains de l'Empa; grâce à elle ils acquièrent sans cesse de nouvelles connaissances.

A côté de la théorie et de l'expérience, la science moderne s'appuie de plus en plus souvent aussi sur les simulations. Celles-ci sont souvent moins coûteuses que les expériences de laboratoire et elles permettent aux chercheurs de manier les systèmes mêmes les plus complexes tels que le système climatique ou des écosystèmes entiers. L'expérience et la simulation et les théories que l'on en tire permettent de représenter et d'expliquer avec toujours davantage de précision les phénomènes de la nature. Ces connaissances peuvent ensuite servir à développer par exemple de nouveaux nano-composants électroniques ou opto-électroniques ou pour la prédiction de la propagation des polluants dans l'atmosphère.

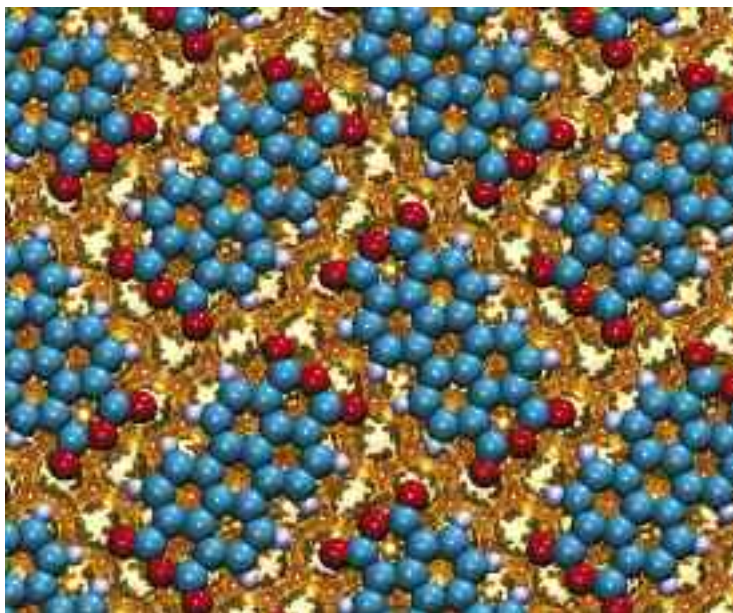
Les ordinateurs de grande puissance maîtrisent la complexité

Mais pour cela, un ordinateur doit posséder une bonne dose de puissance de calcul. Lorsqu'une simulation comporte d'innombrables paramètres ou si elle doit couvrir une très longue période, le volume des données croît de manière considérable. Les ordinateurs usuels tels que les ordinateurs de bureau ou les serveurs simples ne sont pas en mesure de maîtriser un tel flux de données, une seule simulation leur demanderait des semaines, voire des mois.

Les ordinateurs de grande puissance sont eux par contre précisément conçus pour de telles tâches. Ce que l'on dénomme les superordinateurs en constituent l'élite. Pour la «Ligue des champions» des ordinateurs les plus puissants et les plus rapides, il existe même un classement mondial qui est actualisé tous les six mois. Le «Monte Rosa», le meilleur superordinateur suisse en exploitation depuis le mois de juillet 2009 dans le Centre suisse de calcul scientifique CSCS à Manno près de Lugano, occupe par exemple actuellement le 21^e rang dans ce classement.

A l'Empa, un grand nombre de projets en cours sont trop complexes pour un ordinateur standard tout en étant trop «petits» pour un superordinateur. C'est pourquoi l'Empa a construit la ferme de calcul Ipazia dont la puissance de calcul est précisément adaptée à ce genre de projets «moyens», cela en collaboration avec l'institut de recherche sur les eaux Eawag qui y participe pour 15 pour-cent.

Le calcul haute performance – comme l'a attesté le Conseil fédéral dans un plan stratégique – est une technologie clé pour la recherche de pointe et renforce ainsi la compétitivité de la Suisse. «Ipazia n'est ainsi pas isolée mais vient s'intégrer dans un concept global suisse de calcul haute performance» explique Daniele Passerone qui dirige le groupe «Atomistic Simulation» à l'Empa et qui gère la ferme de calcul avec les informaticiens de l'Empa. Chaque projet doit pouvoir être confié au système d'ordinateur le mieux approprié.



Exemple d'une simulation – réseau moléculaire sur une surface métallique. (Photo: Empa)

Les fermes de calcul: un bon rapport prix performances

C'est il y a environ trois ans que l'Empa a commencé à construire sa ferme de calcul Linux Ipazia. Les fermes de calcul sont de plus en plus appréciées depuis quelques années. «Elles présentent un excellent rapport prix/performances; leurs composants sont en majeure partie des éléments standards – mais ayant d'excellentes performances – et sont ainsi relativement bon marché», comme le déclare Passerone pour expliquer ce succès des fermes de calcul.

Une ferme de calcul se compose de plusieurs serveurs, appelés nœuds. L'astuce: la ferme de calcul peut traiter simultanément plusieurs tâches; suivant sa taille, une tâche est distribuée sur un ou sur plusieurs nœuds, mais jamais sur toute la ferme de calcul. Ainsi les différentes tâches sont traitées rapidement et une grosse tâche ne bloque pas le système entier. Les différentes tâches sont coordonnées par un logiciel spécial de sorte que la ferme de calcul peut fonctionner jour et nuit sans intervention humaine. Des liaisons rapides entre les nœuds assurent de plus un échange rapide des données, ce qui est nécessaire pour les simulations complexes qui occupent plusieurs nœuds et demandent un échange de donnée volumineux. Ipazia est le plus souvent gérée à distance, il est rare que quelqu'un doive se rendre dans la cave qui l'abrite. Cette exploitation «commode» a aussi été un argument en faveur d'une ferme de calcul.

Extension en cours

Actuellement Ipazia comporte 46 nœuds. «Mais nous procédons à son extension», explique Passerone. Actuellement déjà 16 de ses 46 nœuds sont reliés entre eux à travers le réseau rapide Infiniband. De plus, quatre fois 16 nœuds supplémentaires (soit 64 au total) ont été commandés, avec le soutien financier du Fonds national suisse (FNS) dans le cadre du programme R'Equip (Research Equipment). Ipazia va donc bientôt comporter 110 nœuds. «Grâce à cette extension nous pourrions à l'avenir calculer tous les projets de taille moyenne de l'Empa et de l'Eawag», commente Passerone. De plus, la capacité de mémoire va être augmentée de 50 terabits. Tout cela demande un refroidissement, qui s'effectue avec de l'eau qui est ensuite encore utilisée pour le chauffage du bâtiment.

Les projets qui utilisent Ipazia sont aussi variés que les activités de l'Empa elle-même. Ils vont du calcul du bruit des trains en passant par la simulation du transport des polluants dans l'atmosphère et jusqu'à la simulation au niveau atomique des piles à combustible ou de la nanostructure des surfaces. Actuellement 15 laboratoires de l'Empa et de l'Eawag utilisent cette ferme de calcul. L'utilisation de ses capacités atteint 75 pour-cent, ce qui signifie en d'autres termes que tous ses nœuds «travaillent» en moyenne plus de 6500 heures par année. //

Hypatia – une scientifique de l'antiquité

Avec le nom de Ipazia – traduction italienne du nom grec Hypatia – l'Empa honore une des rares scientifiques de l'Antiquité. Hypatia, fille du philosophe et mathématicien Théon d'Alexandrie, a vécu en Egypte au 4^e siècle après J.-C. Mathématicienne, astronome et philosophe, elle enseignait au Museion d'Alexandrie auquel était aussi rattachée la célèbre bibliothèque. Elle est l'auteur de nombreux ouvrages et commentaires scientifiques. Elle aurait aussi inventé quelques instruments astronomiques. Les sources de l'époque la décrivent comme une personne ouverte qui jouissait d'une grande estime.

Le film «Agora» sur la vie de Hypatia sortira sur les écrans suisses en été 2010: www.agora-derfilm.de



Portrait de la scientifique Hypatia tiré du livre «Little Journeys to the Homes of Great Teachers» du philosophe américain Elbert Hubbard (v.23 #4, East Aurora, New York: The Roycrofters, 1908)

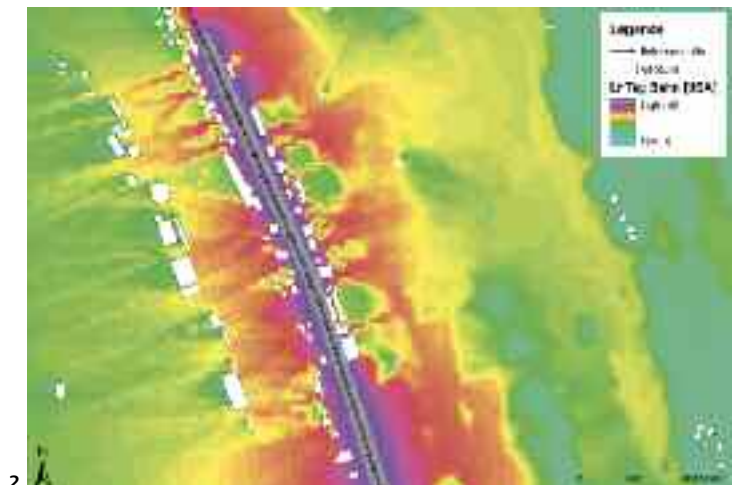
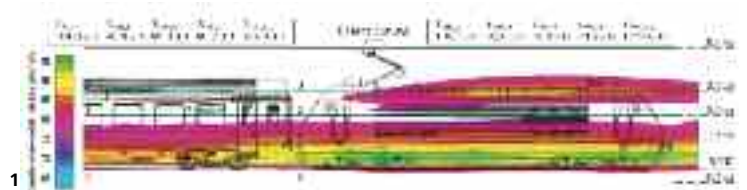
La puissance de calcul pour lutter contre le bruit

La ferme de calcul Ipazia aide les chercheurs de l'Empa à maîtriser les quantités gigantesques de données nécessaires à la simulation de situations complexes. Les acousticiens ont développé par exemple un modèle numérique qui leur permet de calculer l'exposition au bruit le long de la totalité du réseau ferroviaire suisse.

TEXTE: Martina Peter / PHOTOS: Empa

Les trains de marchandise roulent la nuit car de jour le réseau ferroviaire suisse est saturé par le trafic des voyageurs. Cela alors que les wagons de marchandise sont particulièrement bruyants et que la nuit les personnes habitant au voisinage des voies désirent bien évidemment dormir. Si l'on veut assurer le succès du transfert du transport des marchandises de la route au rail, il faut donc réduire nettement les émissions du trafic ferroviaire des marchandises.

L'Office fédéral de l'environnement (OFEV) a ainsi chargé le scientifique Kurt Eggenschwiler du laboratoire Acoustique/Réduction du bruit de l'Empa de développer un modèle de simulation de l'exposition au bruit le long du réseau ferroviaire suisse. sonRAIL, c'est là son nom, doit aussi montrer quelles sont, selon les cas, les mesures de lutte contre le bruit les plus efficaces pour protéger la population. Ce programme ne fournit en effet pas seulement des cartes régionales d'exposition au bruit mais il est même capable de déterminer l'exposition au bruit de chaque bâtiment. sonRAIL permet aux offices fédéraux et aux communes de déterminer le bruit provoqué par les lignes de chemin de fer existantes ou projetées et de vérifier l'efficacité des mesures de protection contre le bruit prévues. En effet, par exemple, un mur antibruit de deux mètres de haut amortit certes le bruit de roulement des roues mais il est sans effet contre le bourdonnement d'un système de ventilation installé sur le toit d'un wagon surbaissé. «Nous ne devons donc pas seulement nous concentrer sur le contact rail-roue mais prendre en considération l'ensemble du système «train», explique Eggenschwiler.



Mesure du bruit de 15 000 trains

Son collègue, l'acousticien Jean Marc Wunderli, a récolté avec une équipe internationale une quantité énorme de données: entre 2007 et 2009 ils ont mesuré le bruit d'environ 15 000 compositions de train sur 18 sites différents. Lors de ces mesures, ils ont aussi identifié toutes les sources de bruit à différentes hauteurs le long des trains et déterminé le niveau sonore de chaque type de composition, données nécessaires pour pouvoir calculer la propagation du bruit au voisinage des voies.

L'intensité du bruit ferroviaire dépend de nombreux facteurs, tels que le type de train, sa vitesse, la réflexion éventuelle sur des bâtiments ou des parois rocheuses, la superstructure de la voie, la topographie du terrain – et finalement aussi des conditions météorologiques. Seule la prise en compte de tous ces facteurs dans le modèle de simulation permet une quantification exacte de l'exposition au bruit. «Pour développer un modèle tel que sonRAIL capable

1
Sur un train, les sources de bruit sont localisées en différents endroits. Sur les roues, mais aussi en hauteur, par exemple sur les systèmes de climatisation.

2
Les calculs effectués sur la ferme de calcul permettent d'analyser et de prévoir avec précision l'exposition au bruit provoquée par le trafic ferroviaire.

>>

de calculer les émissions sonores le long de centaines de kilomètres de voies ferrées et la propagation du bruit sur plusieurs dizaines de milliers de sites d'émission, il faut disposer d'un ordinateur très puissant» explique Wunderli. La ferme de calcul Ipazia est parfaitement adaptée pour cela car elle ne possède pas seulement la puissance de calcul nécessaire mais sa configuration en nœuds (voir article page 14) permet d'effectuer les calculs en parallèle sur différents processeurs et d'économiser ainsi du temps.

40 processeurs travaillant jour et nuit

Dans un premier test pratique, les acousticiens de l'Empa déterminent depuis le début 2010 l'exposition au bruit le long du corridor ferroviaire Nord-Sud à travers la Suisse. Au cours des deux premiers mois ils ont calculé l'exposition au bruit dans une région d'une surface de près de 340 kilomètres carrés au Tessin. Cette région comporte 50 kilomètres de voies, quelque 30000 bâtiments, 17 murs antibruit et 172000 point d'immission. 40 processeurs de l'ordinateur de haute puissance de l'Empa ont fonctionné jour et nuit et effectué plus de 17 millions de calculs de propagation du bruit. Chacun de ces calcul a fourni 14 spectres de fréquences subdivisés en 20 bandes de tiers d'octave – soit au total 1,4 milliards de valeurs individuelles pour la «carte de bruit» de cette région.

Ces résultats montrent que sonRAIL fonctionne bien et fournit des valeurs précises. Les chercheurs s'engagent pour que leur modèle de calcul du bruit soit à l'avenir utilisé comme modèle standard en Suisse et aussi dans le reste de l'Europe. Ils prévoient aussi d'utiliser ce modèle pour d'autres types de bruit, par exemple pour montrer comment le bruit de la circulation routière se propage et gêne les habitants au voisinage des routes. //

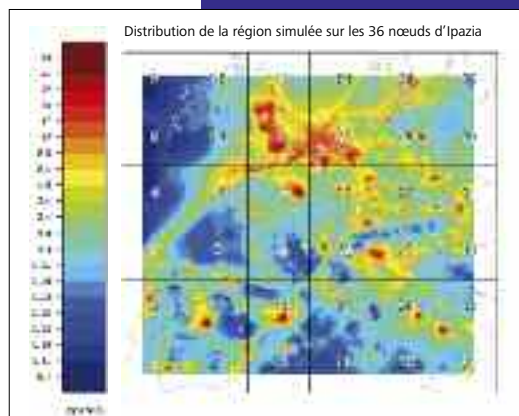
«Et maintenant les prévisions d'ozone pour demain...»

Les spécialistes de la pollution atmosphérique de l'Empa utilisent eux aussi Ipazia. Ils valident avec elle un modèle de transport qui permet d'établir des prévisions «chimiques» pour des polluants atmosphériques.

TEXTE: Martina Peter

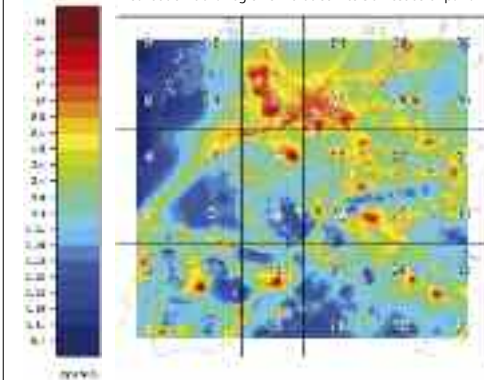
1
Une grille tridimensionnelle fictive est superposée à l'Europe. Chacun des 200 fois 200 carrés d'une arête de 10 kilomètre de cette grille est surmonté d'une pile de 40 cubes subdivisant l'atmosphère en couches sur une hauteur de 20 kilomètres.

2
La simulation réalisée à l'aide de 36 nœuds d'Ipazia montre l'ampleur de la pollution par le dioxyde d'azote dans les différentes régions de l'Europe. (Grafique: Empa)



2

Distribution de la région simulée sur les 36 nœuds d'Ipazia



L'ozone, les oxydes d'azote et les aérosols polluent l'atmosphère. Des stations de mesure en de nombreux endroits renseignent sur l'ampleur de la pollution. Toutefois l'obtention d'informations suprarégionales ou globales nécessite le recours à des modèles de calcul. Seuls ces modèles peuvent montrer à grande échelle quels polluants apparaissent quand, où et en quelles concentrations et encore déterminer la contribution des différents polluants à la pollution globale. De plus, ces modèles permettent d'établir des «prévisions chimiques» ou de reconstituer le «film» du déroulement de certaines situations sur des périodes plus longues.

Pour cela il est nécessaire de déterminer un nombre considérable de processus chimiques et de relier entre eux des centaines de situations instantanées. Ce qui demande de la puissance de calcul – et pas qu'un peu. La ferme de calcul Ipazia de l'Empa en dispose suffisamment.

Une molécule annonce la temps chimique du lendemain

Christoph Knote du laboratoire «Polluants atmosphériques/Technique de l'environnement» travaille à l'Empa à l'adaptation et à l'extension du modèle de transport des polluants chimiques «COSMO-ART, développé par le Karlsruhe Institut für Technologie KIT et qui complète les prévisions météorologiques «traditionnelles». Ce modèle simule comment les polluants atmosphériques produits par les activités humaines (tels que rejets gazeux de l'industrie et gaz d'échappement des véhicules) mais aussi d'origine naturelle (poussières minérales, sel marin ou pollen) se propagent et interagissent entre eux et comment ces processus influencent à leur tour les conditions météorologiques et le climat.

Ce modèle permet aussi de simuler le devenir de substances qui ne proviennent pas directement des émissions polluantes mais ne se forment que secondairement dans l'atmosphère – par exemple l'ozone ou encore une grande partie des aérosols – ce qui permet de prévoir où ces substances prennent naissance et où elles sont transportées.

L'Empa est particulièrement prédestinée pour la validation de ce modèle : elle récolte depuis longtemps déjà des données sur la pollution atmosphérique dans le réseau national de mesure NABEL et suit l'évolution à long terme de la qualité de l'air en Suisse. En comparant les pronostics livrés par l'ordinateur avec leurs données

de mesure, les chercheurs de l'Empa peuvent affiner sans cesse ce modèle en adaptant par exemple les algorithmes sur lesquels repose la simulation ou en réévaluant aussi certaines émissions de polluants.

Tout est lié et interdépendant

Christoph Knote doit tout d'abord entrer dans son modèle de simulation un nombre considérable de données telles que les indications sur les propriétés physico-chimiques des différents aérosols, gaz et substances et sur leurs interactions. Il lui faut aussi tenir compte de variables telles que les conditions de vent, l'intensité du rayonnement solaire, la température et la nébulosité, données qui lui sont fournies par MétéoSuisse. «Tout est lié et interdépendant», conclut en bref ce scientifique.

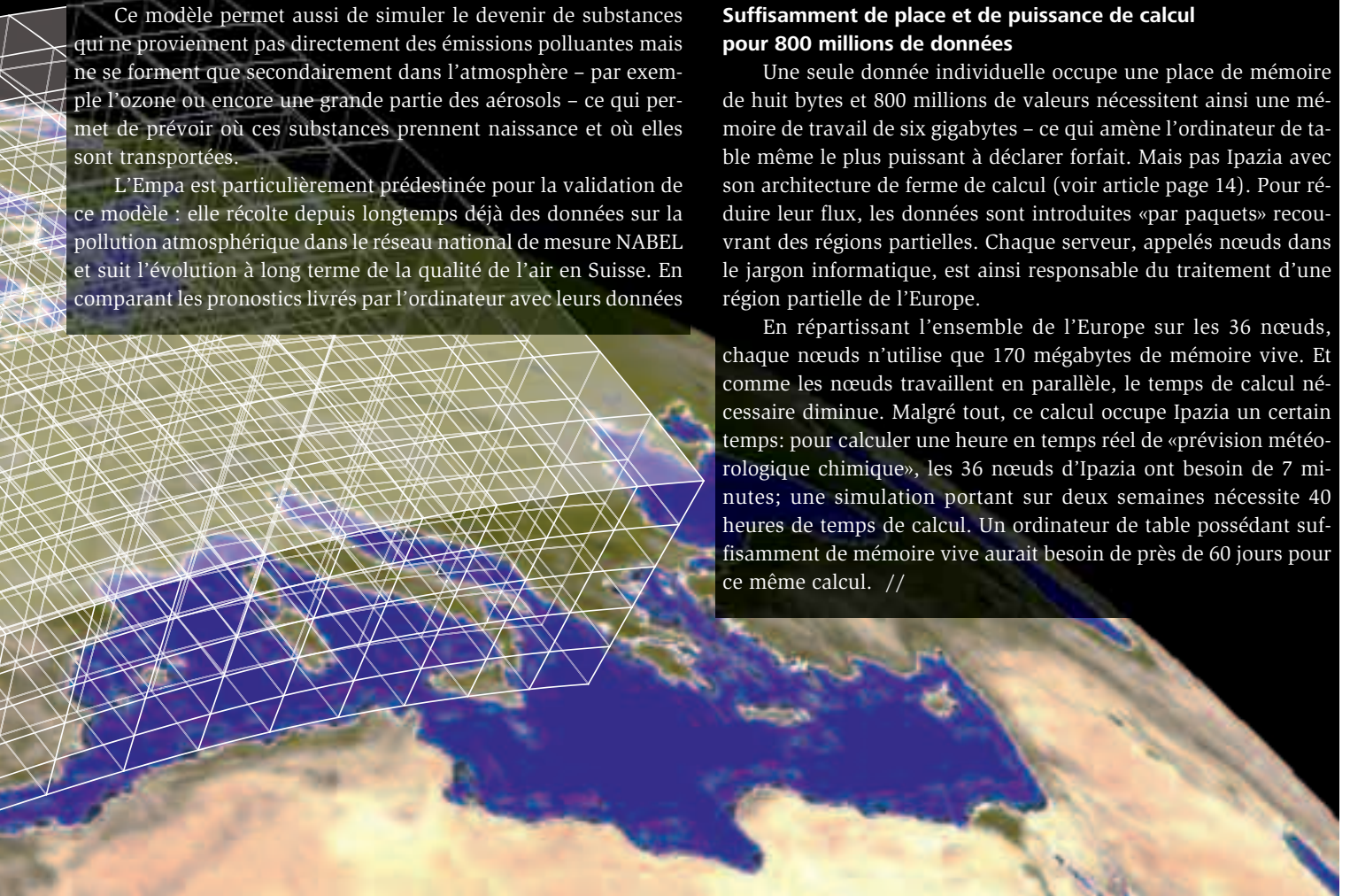
Pour structurer ces innombrables données, Knote a superposé sur l'Europe une grille tridimensionnelle fictive. Chacun des 200 fois 200 carrés d'une arête de 10 kilomètre de cette grille est surmonté d'une pile de 40 cubes subdivisant l'atmosphère en couches sur une hauteur de 20 kilomètres. Dans chacun des ces 1.6 millions de cubes, il peut alors faire entrer en contact (sur l'ordinateur) jusqu'à 250 gaz et aérosols différents qui interagissent et sont transportés différemment selon les conditions météorologiques.

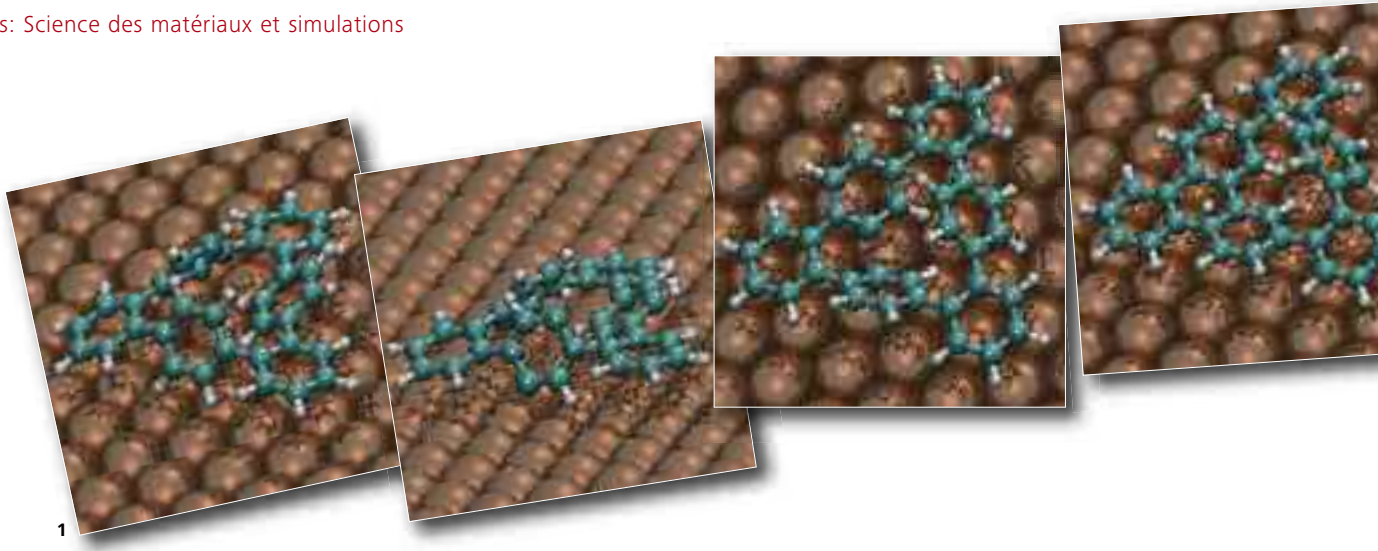
L'ordinateur doit alors mettre en mémoire environ 400 millions de données. Mais pour obtenir un «film» des mouvements entre un moment donné et un moment ultérieur, il faut encore introduire des données qui sont obtenues à l'aide de formules. Ce qui fait alors doubler le nombre des données que l'ordinateur doit traiter et qui atteint 800 millions – et cela pour un seul moment donné!

Suffisamment de place et de puissance de calcul pour 800 millions de données

Une seule donnée individuelle occupe une place de mémoire de huit bytes et 800 millions de valeurs nécessitent ainsi une mémoire de travail de six gigabytes – ce qui amène l'ordinateur de table même le plus puissant à déclarer forfait. Mais pas Ipazia avec son architecture de ferme de calcul (voir article page 14). Pour réduire leur flux, les données sont introduites «par paquets» recouvrant des régions partielles. Chaque serveur, appelés nœuds dans le jargon informatique, est ainsi responsable du traitement d'une région partielle de l'Europe.

En répartissant l'ensemble de l'Europe sur les 36 nœuds, chaque nœuds n'utilise que 170 mégabytes de mémoire vive. Et comme les nœuds travaillent en parallèle, le temps de calcul nécessaire diminue. Malgré tout, ce calcul occupe Ipazia un certain temps: pour calculer une heure en temps réel de «prévision météorologique chimique», les 36 nœuds d'Ipazia ont besoin de 7 minutes; une simulation portant sur deux semaines nécessite 40 heures de temps de calcul. Un ordinateur de table possédant suffisamment de mémoire vive aurait besoin de près de 60 jours pour ce même calcul. //





Les comptes des mille et

Les nanostructures formées de quelques molécules seulement sur des surfaces sont considérées comme les composants possibles de l'électronique et de l'opto-électronique du futur. Pour cela il faut toutefois connaître exactement comment ces structures se forment. Des chercheurs de l'Empa tentent de l'élucider à l'aide de simulations sur ordinateur capables de calculer le comportement de plus de 1000 atomes entre eux; ils désirent aussi trouver par là comment influencer de manière ciblée la formation de ces structures.

TEXTE: Laura Meier / PHOTOS: Empa

Des nanostructures qui s'organisent d'elles-mêmes sur des surfaces pourraient dans l'avenir donner naissance à des transistors, des diodes ou des capteurs moléculaires mais aussi à de nouvelles surfaces fonctionnelles possédant des propriétés bien définies. Pour pouvoir produire des nanocomposants à partir de ces complexes de molécules, les chercheurs doivent tout d'abord connaître comment cette auto-organisation se déroule exactement sur les surfaces.

C'est en effet la nature de la surface – plus précisément sa composition chimique, sa structure et d'autres facteurs encore – qui détermine quelles sont les réactions chimiques susceptibles de se produire ou non dans cet environnement bidimensionnel. C'est elle, par exemple, qui empêche les molécules de s'orienter au hasard sur elle. Cela entre autres du fait des forces qui agissent entre la surface et les molécules de même qu'entre les molécules entre elles et qui contraignent les molécules à occuper une position déterminée.

Simulation du comportement des molécules

Les chercheurs du laboratoire «nanotech@surfaces» de l'Empa étudient au moyen d'expériences et de simulations ces phénomènes d'auto-assemblage. Les simulations sont du ressort de l'équipe de Daniele Passerone qui procède à des calculs pour différentes molécules, telles que par exemple des polymères de type graphène, sur différentes surfaces, le plus souvent en métaux tels que l'or, l'argent ou le cuivre.

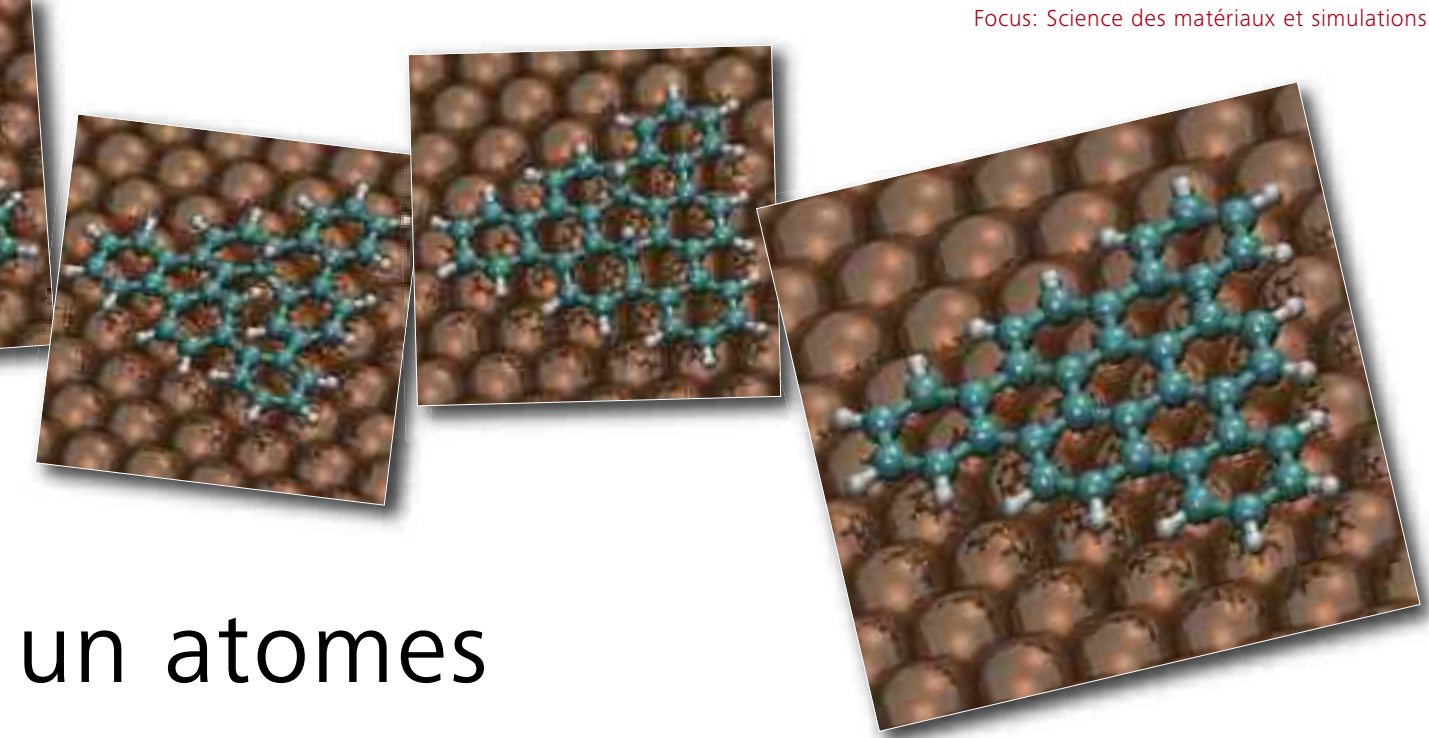
Les calculs conventionnels des propriétés de molécules reposent sur la description des mouvements de chacun de leurs électrons pris isolément, ce qui les rend très complexes dès qu'il faut prendre en compte de nombreuses molécules. Dans les années 60, le futur prix Nobel Walter Kohn a toutefois démontré qu'il n'était pas nécessaire de tenir compte des mouvements de chaque électron isolément. L'énergie et des autres propriétés du système dépendent seulement du nombre d'électrons qui se trouvent en chaque point de l'espace. Cette théorie dénommée théorie de la fonctionnelle de la densité a permis de développer des méthodes de si-

mulation plus simples qui ont permis pour la première fois d'étudier de très grosses molécules. C'est aussi sur cette théorie de la fonctionnelle de la densité que reposent les simulations qu'effectuent les chercheurs de l'Empa.

Les polymères de type graphène: élucidation des voies de réaction

Le graphène et les polymères de type graphène sont actuellement un thème de recherche très prisé. C'est ainsi que l'année dernière le «Prix Körber pour la science européenne» doté de 750 000 Euros a été attribué aux fondateurs de la recherche sur le graphène. Le graphène n'est pas seulement plus dur que le diamant et extrêmement résistant mais aussi imperméable aux gaz. Ce matériau est formé d'une couche bidimensionnelle de carbone dans laquelle les atomes de carbone sont disposés en hexagones. L'enroulement de la couche sur elle-même donne naissance à des nanotubes de carbone et son empilement, à du graphite.

Son excellente conductibilité électrique rend le graphène intéressant en électronique comme remplaçant possible du si-



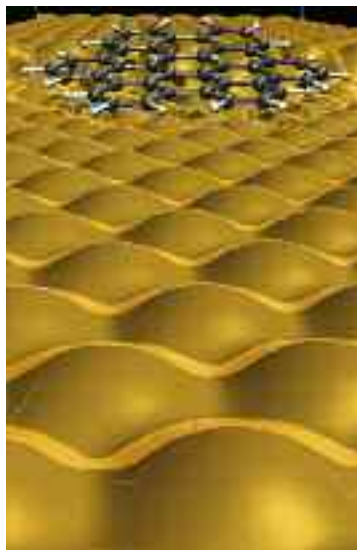
un atomes

1

Leur excellente conductibilité électrique fait du graphène et des polymères de type graphène des candidats intéressants pour l'électronique. Pour cela, il faudrait toutefois pouvoir moduler de manière ciblée cette conductibilité – par exemple en produisant par auto-organisation à partir de molécules des polymères de type graphène présentant des trous de la «bonne» taille aux «bons» endroits. A l'aide de simulations portant sur plus de 500 atomes, des chercheurs de l'Empa étudient quelles sont les étapes intermédiaires d'un tel auto-assemblage.

licium. Pour cela, les chercheurs devraient toutefois pouvoir moduler sa conductibilité – par exemple en créant de manière contrôlée des trous dans la grille de graphène ou en produisant par auto-organisation des polymères de type graphène qui présentent aux «bons» endroits des trous de la «bonne» taille.

A l'aide de simulations, l'équipe de Passerone a étudié quelles sont les étapes intermédiaires par lesquelles passe un tel auto-assemblage. Pour cela elle a effectué, en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité, des calculs portant sur plus de 500 atomes. Ces calculs ont montré que cet auto-assemblage passe aussi bien par des voies de réaction accélérées par l'action catalysatrice de la surface que par des voies de réaction qui se produisent aussi sans catalyse. Ces calculs ont aussi mis en évidence que les forces qui rendent l'auto-assemblage des systèmes ana-



2

2

Une surface d'or aussi lisse soit-elle n'est jamais vraiment plane mais légèrement ondulée. Cela du fait de l'agencement entre eux des atomes d'or. A l'aide d'une simulation portant sur 1700 atomes, les chercheurs de l'Empa ont montré que les molécules organiques ne se fixent pas n'importe où sur une telle surface ondulée.

lysés plus efficace sont les forces de van-der-Waals, une interaction relativement faible qui se produit entre les atomes et les molécules.

Des surfaces d'or fonctionnant comme pochoirs

On utilise souvent des métaux comme surface pour cet auto-assemblage, ainsi aussi de

l'or. On sait toutefois que même les surfaces les plus lisses ne sont pas réellement planes mais légèrement ondulées, comme l'avaient déjà montré des examens dans le microscope électronique. Dans une simulation, les chercheurs de l'Empa ont maintenant confirmé et démontré que les molécules ne se fixent pas partout sur une telle surface ondulée. Portant sur 1700 atomes, cette simulation est l'un des calculs ab initio de plus grande ampleur effectués jusqu'ici à l'Empa. Pour cela, il fallait aussi disposer d'un superordinateur, à savoir celui du Centre suisse de calcul scientifique à Manno.

La cause de l'ondulation des surfaces réside dans l'agencement des atomes d'or. Pour expliquer comment les atomes d'or s'agencent entre eux, on peut les considérer comme des sphères. Il existe plusieurs manières de réaliser par empilement des assemblages aussi compacts que possible, les plus connus étant l'assemblage hexagonal compact (hcp) et l'assemblage cubique à face centrée (fcc). Toutefois les atomes ne se comportent pas simplement comme des sphères car les électrons qui se déplacent librement entre les atomes agissent comme une «colle», ce qui conduit à des effets inattendus, entre autre aussi à l'alternance d'assemblages hcp et fcc qui produit cette ondulation de la surface.

La simulation effectuée par les chercheurs de l'Empa a aussi confirmé que les molécules organiques, telles que celles étudiées pour servir de semi-conducteurs, se déposent de manière préférentielle sur un de ces deux types d'assemblages. Ces connaissances fondamentales pourraient servir un jour à réaliser de manière ciblée des ondulations superficielles utilisables comme «pochoirs» pour produire par exemple des composants électroniques ou opto-électroniques. //



Sur la trace des microfissures

Plus d'un accident d'avion a pour cause des micro-défauts qui n'avaient pas été décelés à temps. Par exemple sur les ailes ou le train d'atterrissage. Sous charge, à elle seule déjà une microfissure peut conduire à la rupture d'une aile. Des chercheurs de l'Empa développent de nouveaux procédés pour déceler à temps de tels défauts.

TEXTE: Laura Meier / PHOTOS: Empa, iStock



Petites causes grands effets: les microfissures sont certes des dommages à peine visibles mais, sur les avions, elles peuvent conduire à la rupture d'une aile ou du train d'atterrissage lorsqu'elles ne sont pas décelées à temps. Actuellement, les avions ont une durée de service moyenne d'environ 30 ans. Afin d'assurer leur sécurité sur toute cette période, ils sont soumis à des inspections et à un entretien réguliers. Un de leurs composants particulièrement sollicités est leur train d'atterrissage. Un atterrissage brutal ou des impacts dus par exemple par la présence de cailloux sur la piste peuvent provoquer des microfissures sur le train d'atterrissage.

Des vibrations révélatrices

Une surveillance permanente pourrait aider à déceler à temps ces microfissures pour procéder aux réparations nécessaires. Dans le laboratoire «Mechanical Systems Engineering» de l'Empa, l'équipe de Christian Dürager développe un système comportant des éléments piézo-électriques pour assumer cette tâche. De tels systèmes de monitoring sont capables «d'avoir à l'œil» en permanence aussi bien les structures métalliques usuelles que les structures high-tech en composites. La piézoélectricité est la propriété que possèdent certains corps de se déformer lorsqu'on leur applique une tension électrique et réciproquement de produire une tension électrique sous l'action d'une contrainte

mécanique. Sur le système développé ici, des disques piézoélectriques de la taille d'une pièce de cinquante centimes excitent des vibrations dans la structure à surveiller à l'aide d'une tension alternative et mesurent ensuite son comportement vibratoire. Les fréquences de

vibration d'une structure diffèrent en effet selon qu'elle est intacte ou endommagée, ce qui permet de déterminer la présence ou non d'un dommage. L'amplitude des vibrations provoquées n'atteint qu'une fraction de micromètre.

Des constructeurs d'avions déjà très intéressés

Cette technique ne permet pas seulement de surveiller des trains d'atterrissage mais aussi des ailes entières. Pour cela, les scientifiques de l'Empa travaillent avec la haute école technique de Buchs (NTB) au développement d'un réseau sans fil de capteurs et de l'électronique nécessaire. Avec une disposition «judicieuse» des capteurs, le réseau est en mesure de déterminer la position et la taille des dommages. Rien d'étonnant ainsi à ce que des constructeurs d'avions aient déjà manifesté leur intérêt pour ce développement.

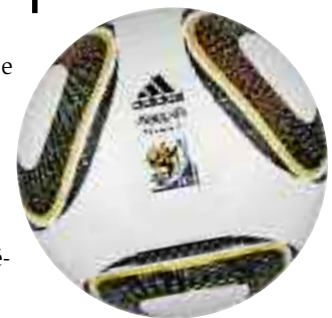
Un vaste domaine d'application

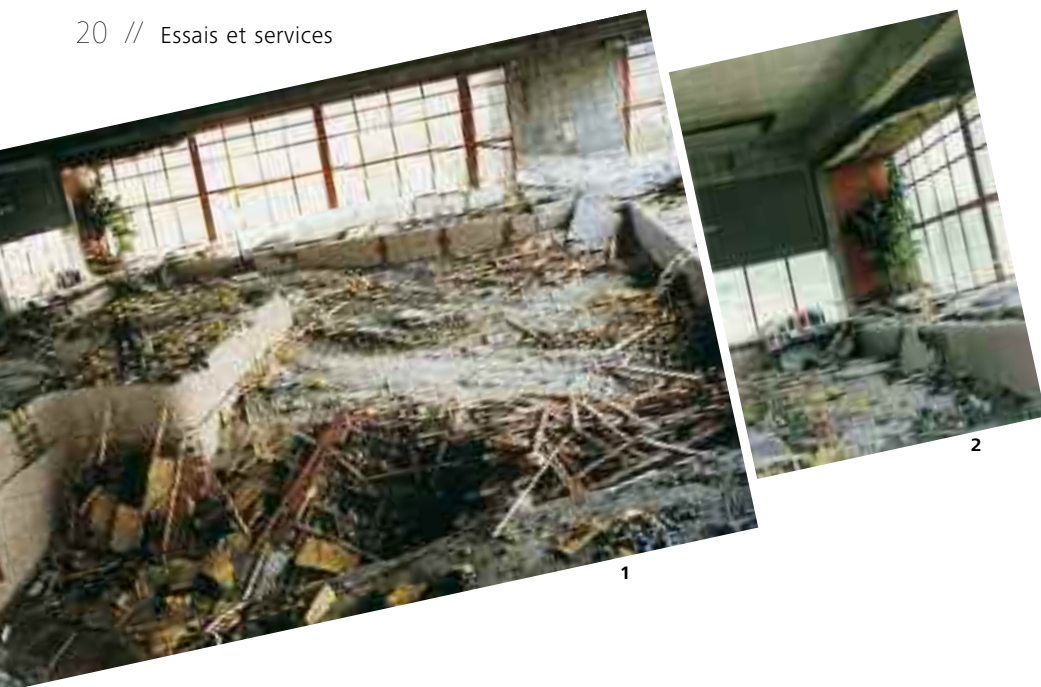
L'aéronautique n'est pas le seul domaine d'application de ces systèmes de monitoring utilisant des capteurs piézo-électriques; un monitoring des structures pourrait aussi être utile sur les trains ou les téléphériques où il permettrait de contrôler la présence éventuelle de fissures sur les éléments porteurs. Il pourrait aussi servir à détecter les fuites sur les pipelines ou autres conduites. D'ici là il faut toutefois encore un peu de temps. «Nos résultats sont certes une étape dans la bonne direction, mais nous devons encore améliorer ce système», explique Dürager. Son groupe travaille actuellement en collaboration avec l'Institut für Automatik de l'EPF de Zurich au développement d'algorithmes de traitement des signaux destinés à assurer une adaptation automatique de ce système de monitoring aux conditions environnementales. //

Si les microfissures ne sont pas décelées à temps elles peuvent conduire à la rupture du train d'atterrissage. Les chercheurs de l'Empa travaillent au développement d'un système capable d'assurer une surveillance continue. Sur la photo, le module de surveillance sans fils monté dans le puits du train d'atterrissage d'un planeur. L'élément piézo-électrique (en orange) est fixé sur la jambe du train.

Jabulani en test de l'Empa

L'Empa a testé le ballon officiel de la Coupe du monde de football qui se déroulera du 11 juin au 11 juillet 2010 en Afrique du Sud. Entre autres son absorption d'eau, qui doit rester minimale, et la stabilité de sa forme et de sa taille. L'Empa, en tant que partenaire universel de la Fédération internationale de football association FIFA est le seul laboratoire d'essai au monde à tester officiellement et en exclusivité les ballons destinés aux grandes manifestations footballistiques (pour les détails du programme de test, voir EmpaNews 21). (Photo: Adidas)





1
La piscine couverte d'Uster le 10 mai 1985: l'aspect des dommages le lendemain matin de la catastrophe. Les experts de l'Empa sont encore à la recherche d'indices sur les causes de la catastrophe.

2
Seule une petite partie du plafond est restée suspendue dans l'angle nord-est de la piscine.

3
Sur 55 des 95 étriers rompus, la surface de rupture était corrodée de 76 à 100 pour-cent. Cette corrosion n'était toutefois que difficilement décelable depuis l'extérieur. D'autres fissures sont visibles au voisinage de la surface de rupture.

Un effondrement dû à la corrosion par le chlore

2010 marque les 25 ans de la catastrophe de la piscine couverte d'Uster. Les experts de l'Empa avaient alors analysé les causes de cet effondrement qui avait coûté la vie à douze personnes. Leurs conclusions: corrosion fissurante sous tension des étriers de suspension

TEXTE: Beatrice Huber / PHOTOS: Empa

Dans la commune d'Uster, ce 9 mai 1985 était un jeudi comme un autre – tout au moins jusqu'au soir à huit heures et demi. C'est à ce moment que se produisit une catastrophe dans la piscine couverte de la ville. Son plafond s'effondra subitement sur le bassin, ensevelissant sous lui les nageurs. Le bilan de cet accident: douze morts et 19 blessés graves.

Peu après minuit déjà, le juge d'instruction du district d'Uster fit appel aux experts de l'Empa qui durant toute la nuit procédèrent au relevé des indices et à des prélèvements d'échantillons. Les analyses durent être réalisées sous la pression des événements. Dans le milieu des années 1980 déjà, les médias se faisaient l'écho d'une négligence et d'un bâclage général dans les constructions réalisées dans les années 70. Urs Meier, alors chef du département « Matériaux de construction » et vice-directeur de l'Empa et qui devait de ce fait répondre aux questions pressantes de médias, se souvient : « Nous nous battions surtout pour que l'on ne parle pas de négligence grave avant de disposer de résultats d'examen. »

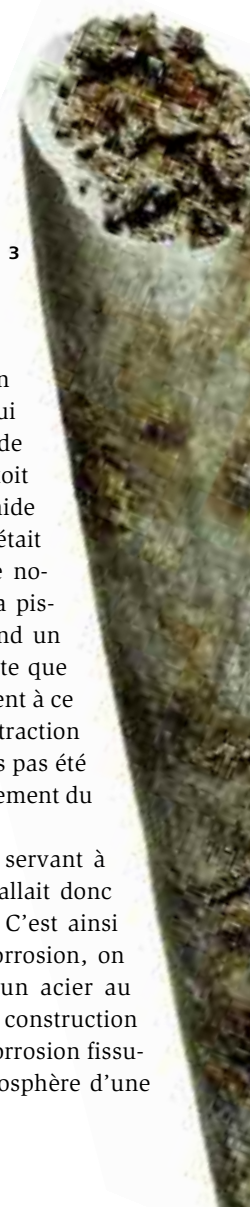
Les experts de l'Empa voulaient déterminer les causes effectives et communiquer aussi rapidement que possible leurs conclusions aux milieux spécialisés concernés. Très vite ils purent exclure un bâclage à grande échelle des travaux, ainsi que le précisa aussi le juge d'instruction lors d'une conférence de presse: « La thèse d'une négligence générale lors de la construction [...] n'est pas soutenable. » La cause principale ressortant des examens effectués était bien plutôt une corrosion fissurante sous contrainte des étriers de suspension.

Des étriers de suspension en acier inoxydable ...

La piscine couverte d'Uster avait été construite en 1970/72. On avait alors coulé à l'intérieur de ce qui devait devenir la halle un plafond en béton muni de 207 étriers de suspension pour ensuite réaliser le toit proprement dit auquel le plafond avait été fixé à l'aide de ces étriers. A partir du début 1972, le plafond était suspendu librement sans coffrage et au mois de novembre les premiers nageurs plongeaient dans la piscine. Par la suite on avait appliqué sur ce plafond un crépi acoustique et un revêtement de bois de sorte que finalement sa masse était supérieure de 30 pour-cent à ce qui était prévu initialement. Les contraintes de traction élevées agissant sur les étriers n'auraient toutefois pas été à elles seules suffisantes pour provoquer l'effondrement du plafond.

Le vide entre le plafond suspendu et le toit servant à l'aspiration de l'air de la halle de la piscine, il fallait donc s'attendre à la présence de chlore dans ce vide. C'est ainsi que, pour des raisons de protection contre la corrosion, on avait choisi des étriers en acier inoxydable – un acier au chrome-nickel. A l'époque, les spécialistes de la construction ignoraient cependant que cet acier est sujet à la corrosion fissurante sous tension lorsqu'il se trouve dans l'atmosphère d'une piscine.

3



Des experts en dommages très demandés

Pratiquement depuis sa fondation les experts de l'Empa en matière de dommages ont été régulièrement mis à contribution lorsqu'il s'agissait de déterminer les causes d'effondrement d'ouvrages de construction. A nouveau récemment pour un cas à St-Gall.

Après d'importantes chutes de neige, le matin tôt du 24 février 2009 une épaisse couche de neige recouvrait le toit de la halle de sport de l'école professionnelle située dans le quartier de Rietehüsli à St-Gall – manifestement trop de neige pour ce toit qui s'effondra vers 6 heures du matin, causant des dommages considérables. Mais les conséquences auraient pu être bien plus graves encore car 90 minutes plus tard de nombreux élèves se seraient déjà trouvés dans la halle pour suivre leurs leçons de gymnastique. Un gros choc, d'autant plus que cette halle de sport n'avait pas même trois ans. Le juge d'instruction chargea des experts de l'Empa de déterminer les causes de cet effondrement. Une équipe interdisciplinaire de spécialistes inspecta les lieux, analysa des échantillons prélevés sur les piliers de béton et les poutres d'acier et procéda à une simulation de l'effondrement sur ordinateur.

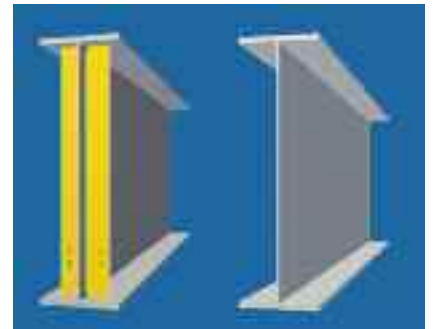
Des poutres principales qui cèdent

Les conclusions émises par les experts dans leur rapport de 200 pages: la résistance des sept poutres principales était nettement trop faible, car ces poutres ne répondaient pas aux normes. Pour empêcher le flambage des poutres métalliques élancées en double T telles que celles utilisées à St-Gall celles-ci doivent comporter des nervures de raidissement à leurs extrémités, Ce qui n'était pas le cas ici.

Avec cette couche de neige d'environ 50 centimètres, qui était certes la charge la plus élevée enregistrée depuis la construction de la halle mais toutefois toujours inférieure à la capacité portante maximale à prendre en compte, la sollicitation exercée sur une des poutres principales devint trop élevée et provoqua son flambage. Cette défaillance entraîna une réaction en chaîne le long des six autres poutres principales. Du fait de la charge «excentrique» exercée sur elles, les têtes des piliers du côté des fenêtres se rompirent et le toit s'affaissa du côté de la façade vitrée. Du fait de la charge de flexion extraordinaire, les boulons de fixation de toutes les poutres du côté de la salle de musculation (vis-à-vis des fenêtres) furent cisailés et le toit s'effondra finalement librement sur le sol de la halle de sport.



La halle de sport de l'école professionnelle Riethüsli à St-Gall après l'effondrement. (Photo: Empa)



Croquis d'une poutre avec (à gauche) et sans (à droite) nervures de raidissement terminales. (Illustration: Empa)

... se mettent à se corroder

Lorsque l'air évacué de la piscine est entré en contact avec les étriers dans cet espace vide, il s'est formé sur eux un film d'humidité acide renfermant du chlore. Ce qui, avec les années, a conduit à la formation de piqûres de corrosion. Sous les fortes contraintes de tension auxquelles étaient soumis les étriers, il s'est formé à partir de ces piqûres des fissures qui ont progressé toujours plus en profondeur. Les premiers étriers se sont alors rompus, augmentant ainsi la charge exercées sur les étriers voisins. Ce phénomène s'est poursuivi jusqu'à ce que la limite de résistance de la suspension du plafond soit finalement dépassée.

Sur 55 des 95 étriers rompus, la surface de rupture était corrodée de 76 à 100 pour-cent. Cette corrosion n'était toutefois que difficilement décelable depuis l'extérieur pour un professionnel de la construction car l'acier inoxydable au chrome-nickel ne prend pas une teinte rouille uniforme mais ne présente que quelques points bruns lorsqu'il se corrode. Pour un contrôle fiable, il aurait fallu démonter les étriers et procéder sur eux à des examens de laboratoire. Les méthodes non destructives actuellement disponibles n'existaient pas il y a 25 ans.

Renforcer la formation continue et la collaboration

Pour diffuser parmi les professionnels les conclusions à tirer de la catastrophe d'Uster, l'Empa a alors lancé une campagne de sensibilisation et organisé six mois déjà après l'accident un séminaire sur le comportement à la corrosion des aciers. «Dans la construction aussi on s'est alors rendu compte que la formation continue est des plus importantes» commente Meier. Cette campagne n'est pas restée une action isolée mais elle demeure une tâche permanente. Ainsi les experts de l'Empa Markus Faller et Peter Richner ont publié 15 ans après l'accident d'Uster une étude destinée à sensibiliser aussi les jeunes ingénieurs sur ce thème. Cette étude demeure aujourd'hui encore très demandée. Ses auteurs y résument les directives applicables pour le choix des matériaux destinés aux éléments importants pour la sécurité dans les piscines couvertes et indiquent surtout comment contrôler avec fiabilité ces éléments. «Les éléments importants sur le plan de la sécurité doivent rester contrôlables», relève Markus Faller. Car la catastrophe d'Uster ne doit pas se répéter. Cette sensibilisation va encore plus loin: «Nous voulons diffuser largement les connaissances sur le comportement à la corrosion des aciers et veiller à ce qu'elles ne se perdent pas.» Un point important, car la construction de piscines est un domaine florissant – grâce aussi à la mode du wellness. //

Des salissures qui améliorent les diodes

L'Empa et le constructeur automobile japonais Toyota ont étudié les variations de qualité des diodes des convertisseurs de courant continu/ alternatif utilisés dans les véhicules hybrides. Il est apparu que la présence d'impuretés de carbone dans les wafers de silicium à partir desquels ces diodes sont produites améliorerait le comportement de commutation de ces diodes.

TEXTE: Beatrice Huber

Les composants microélectronique tels que les diodes sont fabriqués à partir de matériaux semi-conducteurs, typiquement du silicium. Les impuretés de carbone présentes dans les wafers de silicium améliorent le comportement des diodes ainsi que le montre une étude de l'Empa.

Sur les véhicules hybrides, rien ne fonctionne sans électronique de puissance. Et le convertisseur de courant alternatif/continu est ainsi un composant central sur ces véhicules. Ce convertisseur fait office de «traducteur» entre le moteur électrique convertible en alternateur qui consomme ou produit (grâce au freinage récupératif) du courant alternatif et la batterie qui ne peut stocker et recéder que du courant continu. Ce convertisseur renferme ce que l'on nomme des diodes PIN comme éléments redresseurs pour transformer le courant alternatif en courant continu. Toutefois le comportement de commutation de ces diodes varie en partie notablement d'une diode à l'autre, ce qui conduit à des pertes de puissance et à des surtensions indésirables dans le convertisseur. C'est la raison pour laquelle seule une partie de la production de ces diodes est appropriée à une utilisation dans des convertisseurs.

Bien que des méthodes de test permettent de bien maîtriser ce problème, Toyota désirait absolument savoir quels étaient les effets physiques fondamentaux responsables de ces variations de qualité. Les chercheurs de l'Empa réunis autour d'Oliver

Gröning se sont mis à la recherche de ces causes en collaboration avec Toyota. Ils ont alors découvert que ces variations de qualité provenaient des wafers de silicium, plus précisément de l'interaction des impuretés de carbone qu'ils renferment avec les défauts provoqués de manière ciblée par bombardement avec des ions hélium. Ces défauts modifient la durée de vie des porteurs de charge et contribuent à réduire le courant de fuite de la diode lorsque qu'elle commute de son état bloqué à son état passant. C'est ce courant de fuite, qui s'écoule tout de même dans la direction bloquée, qui peut conduire aux pertes de puissance et aux surtensions et qu'il s'agit donc de maintenir au plus bas niveau possible.

Une solution simple: sélectionner les wafers de silicium «impurs»

Les composants microélectronique tels que les diodes sont fabriqués à partir de matériaux semi-conducteurs, typiquement du silicium. Des plaquettes de silicium, dénommées wafers, sont découpées dans des barreaux monocristallins de silicium de haute pureté (99,9999 pour-cent). Ces barreaux monocristallins sont obtenus par éti-

vement à partir d'un bain de silicium en fusion. L'inclusion d'impuretés de carbone n'est jamais totalement évitable. Lors de ce processus de croissance du monocristal, la concentration de carbone augmente du haut vers le bas des barreaux dont la hauteur peut atteindre jusqu'à deux mètres.

Et ceci à des conséquences pour les diodes produites à partir de ces barreaux: ce sont les diodes qui présentent les concentrations de carbone les plus élevées qui possèdent les meilleures caractéristiques de rendement, soit celles provenant de la partie inférieure du barreau. Ce qui fait dire au chercheur de l'Empa Oliver Gröning: «Les impuretés peuvent ainsi parfaitement avoir des effets positifs.»

Toyota est des plus satisfaits de ces résultats. «Nous sommes non seulement parvenus à démontrer empiriquement l'existence d'une relation entre la variation de la qualité des diodes PIN et la position du wafer de silicium dans le barreau monocristallin mais aussi à éclaircir les causes physiques de cette variation», explique Gröning. «Car pour Toyota un problème n'est vraiment résolu que lorsqu'on en a réellement saisi le cœur.» //



Le trafic automobile est une source importante d'oxydes d'azote. (Photo: Empa)

L'azote – un toxique

Les composés azotés relâchés dans l'atmosphère demeurent un problème environnemental pressant. Lors d'un congrès de l'Empa, des spécialistes ont discuté des moyens pour le résoudre.

TEXTE: Beatrice Huber

En 2008, la Suisse a certes émis environ 50% moins de composés azotés qu'à la fin des années 1980; La recherche ne sonne cependant pas encore la fin de l'alerte. Telle est la conclusion du congrès «Les composés azotés dans l'atmosphère» que l'Empa et l'Office fédéral de l'environnement avaient organisé le 21 janvier à l'Académie Empa. Quelques 120 spécialistes y ont discuté des sources, des nouvelles techniques de mesure et des concepts de réduction de ces émissions.

C'est avant tout dans les villes et le long des grands axes routiers que les concentrations de dioxyde d'azote restent trop élevées, ainsi que le montrent les mesures du Réseau national d'observation des polluants atmosphériques NABEL que gère l'Empa sur mandat de l'Office fédéral de l'environnement OFEV. Le dioxyde d'azote provoque une irritation des voies respiratoires et nuit ainsi à la santé. Des innovations techniques, telles que le support de catalyseur à base de mousse céramique développé par l'Empa, peuvent cependant contribuer à réduire notablement les concentrations de dioxyde d'azote si elles sont utilisées de manière conséquente.

Pour parvenir à réduire à un niveau non préjudiciable les concentrations de dioxyde d'azote et des autres composés azotés, il faudrait réduire de moitié leurs émissions. Et comme ces composés sont transportés sur de grandes distances dans l'atmosphère, cette réduction demande des efforts coordonnés au niveau international. Robert Gehrig, chercheur de l'Empa et organisateur de ce congrès, a montré comment le «European Monitoring and Evaluation Programme» (EMEP), avec un réseau de 100 stations de mesure réparties dans 51 pays, observe et procède à la modélisation du transport et de la déposition des composés azotés. C'est ainsi qu'en Suisse, par exemple, 14600 tonnes (sur un total de 16200) des nitrates déposés proviennent de sources étrangères, mais la Suisse en «exporte» de son côté environ 20000 tonnes vers ses voisins européens. //



«Rent-an-academy»



L'Empa accorde une importance particulière au dialogue entre les spécialistes de la science et de l'économie et elle entretient également ce dialogue avec le grand public. C'est aussi pourquoi elle s'est donné avec l'Académie Empa une plateforme pour ses manifestations d'information et de formation. Les Apéros scientifiques ainsi que les Colloques-Empa sont des points fixes parmi ces manifestations.

Lors des colloques Empa, des orateurs invités présentent leurs travaux de recherche. Ces conférences s'adressent aux spécialistes des différentes disciplines de la technique et des sciences physiques et naturelles.

Pour de plus amples informations sur les manifestations de l'Empa, consultez son site Internet www.empa-akademie.ch. Pour obtenir directement le calendrier des manifestations, par e-mail ou sous forme imprimée, adressez-vous à www.empa-akademie.ch.

La majorité des manifestations de l'Empa à Dübendorf se déroulent dans son bâtiment «AKADEMIE», une salle de conférence de 250 places. Cette salle peut aussi être louée par des tiers pour des congrès et séminaires, des assemblées générales d'associations professionnelles ou des cours de formation. Equipée de toute l'infrastructure multimédia nécessaire, elle est aménageable à volonté et peut être subdivisée. Le restaurant d'entreprise de l'Empa se trouvant juste à côté, le catering est aussi assuré. Contact: empa.akademie@empa.ch. //

Leur opinion

André Borschberg



André Borschberg
CEO et co-fondateur de Solar Impulse

“

Voler sans carburant,
jour et nuit uniquement
grâce à l'énergie solaire
nous force à repousser
les limites dans tous
les domaines. L'Empa,
grâce à sa connaissance
dans le domaine de
recherche de matériaux
apporte à Solar Impulse
une aide précieuse.

”

Manifestations

31 mai 2010

Erdbeben – Wie sicher sind unsere Häuser?

Apéro scientifique

Empa, Dübendorf

1 et 8 juin ou 15 et 22 juin 2010

Ökologische Kennzahlen von Fahrzeugen
und Flotten

Cours de certificat

Pour des gestionnaires de flotte, des professionnels
de l'environnement, la force de vente des véhicules et
des collaborateurs du secteur automobile et pétrolier
Empa, Dübendorf

3 juin 2010

Fussball – auch die Wissenschaft spielt mit

Apéro scientifique

Empa, St. Gallen

8 à 10 juin 2010

ACP Symposium 2010

Symposium on Atmospheric Chemistry
and Physics at Mountain Sites
Interlaken, Schweiz

11 juin 2010

Forschung ohne Gentechnologie –
Realität oder Fiktion

Demi-journée de stage en laboratoire
Empa, St. Gallen

28 et 29 juin 2010

Thermodynamic Modeling in Cementitious Systems

3. GEMS Workshop
Empa, Dübendorf

Détails et calendrier de toutes les manifestations
sous: www.empa-akademie.ch

Votre accès à l'Empa:



portal@empa.ch
Tél. +41 44 823 44 44
www.empa.ch/portal