

Journée des Doctorantes et Doctorants 2023

Mardi 27 juin à l'amphi Istil, Bâtiment Polytech

Programme :

- 9h** **Le mot de la direction**
- 9h10 – 9h15** **Présentation de la Société Française de Physique par Alfonso San Miguel**
- 9h15 – 10h** **Session 1 - Présentations orales des doctorant·e·s de 1ère année (5+1 min)**
- Mehdi Ouadfel :** Thermoélectricité nanofluidique haute performance en utilisant des surfaces planes et polarisées
- Chloé Sanz :** Développement d'un nouveau potentiel pour les argiles et molécules organiques par une approche d'apprentissage automatique
- Abel Feuvrier :** Développement d'un spectromètre à double peigne de fréquences dans le domaine UV
- Ludovic Gardré :** Molecular Dynamics of lipid layers
- Gaël Huynh :** Modélisation de la plasticité induite par transformation dans la zirconie par calculs de structure électronique et potentiels machine learning
- Charlène Bouanchaud :** Caractérisation structurale et optique de nanohybrides d'or auto-organisés, tempérés par des protéines
- 10h – 10h45** **Poster & café : Posters des doctorant·e·s de 2ème et 3ème année**
- 10h45 – 11h45** **Session 2 - Présentations orales des doctorant·e·s de 1ère année (5+1 min)**
- Julien El Hajj :** Multiscale simulations of thermal transport around optically heated heterogeneous nanoparticles in water
- Hao Yuan :** Singlet Oxygen Generation by Atomically Precise Metal Nanoclusters for Biomedical Applications
- Antoine Ollivier :** Étude expérimentale et simulation numérique de concentration de contrainte dans les cristaux
- Leila Issoufou Alfari :** Imagerie des contraintes à l'échelle nanométrique à l'aide de nanocristaux fluorescents
- Mehdi Fawaz :** Laser / Nanoparticles interaction
- Arthur Durand :** Applications of chelating biopolymers in the context of chronic inflammation related to oxidative stress
- Lucie Vovard :** Brillouin Light Scattering to probe molecular crowding in cells

- 11h45 – 13h45** **Pique-nique au square de la Doua**
Apportez votre repas pour que nous puissions déjeuner ensemble
- 13h45 – 14h45** **Session 3 - Présentations orales des doctorant·e·s de 1ère année (5+1 min)**
- Nicolas Herreyre :** Nouvelle méthode de caractérisation et de datation du mortier de chaux
Elise Rosson : Formulation de peptides et développement d'un nouveau système de délivrance pour le traitement de pathologies neurotraumatiques et de troubles neurocognitifs
- Thomas Perros :** Physics of regeneration, Mechanobiochemical coupling, experiments and modeling
- Bastien Isabella :** Congélation de bulles dans un liquide
Sacha Bouvier : Etudes expérimentales des interactions entre fibres de verre micrométriques
Antoine Bernard : Développement de guides d'onde à gain par décollement de couches déposées par laser pulsé
- Goulven Rouillé :** Réalisation d'un canon à électron sur puce
- 15h – 16h** **Groupes de discussion doctorant·e·s/membres du laboratoire**
- 16h – 17h** **Atelier TeamDoc**
- 17h** **Cocktail de la JDD en salle de convivialité**

Thermoélectricité nanofluidique haute performance en utilisant des surfaces planes et polarisées

Mehdi Ouadfel

MMCI

La chaleur perdue est l'une des plus grandes sources d'énergie propre et non coûteuse à notre disposition. Le but de cette thèse est d'utiliser des systèmes nanofluidiques pour générer de la thermoélectricité, c'est-à-dire convertir de la chaleur perdue en électricité. Il a été montré que l'efficacité de ces dispositifs nanofluidiques pourrait atteindre celle des meilleurs matériaux thermoélectriques, spécialement dans le cas de surfaces avec peu de friction. Notre but est d'explorer ce genre de configuration pour identifier les configurations avec une haute efficacité de conversion thermoélectrique, et ceci en utilisant une approche multi-échelle, combinant simulations atomique, pour capturer les effets moléculaires à proximité de la surface, et simulations continues, pour décrire le système à une plus grande échelle.

Développement d'un nouveau potentiel pour les argiles et molécules organiques par une approche d'apprentissage automatique

Chloé Sanz

Physico-chimie théorique

Dans le contexte de la pollution des sols par des micropolluants organiques, les argiles, naturellement abondantes et possédant de grandes capacités d'adsorption, jouent un rôle clé. Une description précise des interactions moléculaires est indispensable pour comprendre les mécanismes d'adsorption, rétention et dégradation des molécules dans les sols. Pour cela, il est proposé de développer via des méthodes de machine learning tels les réseaux de neurones des potentiels atomiques présentant grande flexibilité et précision. Ce projet, en collaboration avec une équipe d'expérimentateurs de Grenoble, a pour but de développer de tels potentiels pour différents systèmes argileux.

Développement d'un spectromètre à double peigne de fréquences dans le domaine UV

Abel Feuvrier

Équipe ATMOS

La spectroscopie à double peigne de fréquences (Dual-Comb Spectroscopy, DCS) est une technique émergente rapide, précise et sensible, implémentée du THz au visible. En physique atmosphérique, elle pourrait servir à tracer certaines molécules importantes absorbant dans l'UV. L'objectif de mon travail de thèse est donc d'implémenter la DCS dans l'UV.

La DCS utilise les battements entre deux peignes en fréquences ayant des fréquences de répétition légèrement différentes. La cohérence mutuelle entre ces peignes est donc cruciale. On utilisera donc une cavité laser Ti:Sa bidirectionnelle, qu'on optimisera d'abord dans l'IR avant de passer dans l'UV par doublage puis triplage de fréquence.

Molecular Dynamics of lipid layers

Ludovic Gardré

TheoChem Team

Lipid layers are biological structures known to be notably found in joints, where they highly improve lubrication. However, the mechanisms of such improvement are not fully understood yet.

In collaboration with experimentalists from Charles Sadron Institute in Strasbourg, we build models of lipid stacks adsorbed on model substrates to study their structure and response to mechanical stress, under varying conditions (temperature, humidity, chemical composition, ...).

During this PhD, my goal is to reproduce at best the experimental setup and results using all-atom Molecular Dynamics to better understand, at the atomic scale, the role of lipid layers in lubrication.

Currently, I focus on comparing ionic charge density profiles from MD simulations of zwitterionic or charged lipid layers with continuous models based on Poisson-Boltzmann equations.

Modélisation de la plasticité induite par transformation dans la zircone par calculs de structure électronique et potentiels machine learning

Gaël Huynh

Modélisation de la matière condensée et des interfaces

Les céramiques de zircone possèdent une plasticité induite par transformation (effet TRIP) qui permet une déformation plastique importante et leur confère des propriétés de mémoire de forme. Cependant, les potentiels interatomiques empiriques ne parviennent pas à décrire le polymorphisme et les transformations de phase de ce matériau. Afin de remédier à ce problème, nous avons développé un potentiel, léger et précis, reposant sur des méthodes d'apprentissage machine et entraîné sur des données *ab-initio*. Ce nouveau modèle nous permettra d'étudier l'effet TRIP à un niveau plus fondamental.

Caractérisation structurale et optique de nano-hybrides d'or auto-organisés, tempérés par des protéines

Charlène Bouanchaud

iLM, SpectroBio

Ma thèse consiste à étudier les relations structures-optiques de nanoparticules d'or stabilisées par des protéines déstructurées. En effet, leur taille nanométrique leur confère des propriétés moléculaires et optiques uniques qui se sont révélées être des agents prometteurs dans le domaine de l'imagerie biomédicale par exemple. Pour se faire, une première étape de caractérisation par spectrométrie de masse et mobilité ionique sera nécessaire. Ensuite, les réponses optiques seront principalement analysées par spectroscopie d'absorption et de fluorescence.

Multiscale simulations of thermal transport around optically heated heterogeneous nanoparticles in water

Julien EL HAJJ

MODÉLISATION DE LA MATIÈRE CONDENSÉE ET DES INTERFACES

Heat treatment has recently received a lot of attention for its potential applications in nanomedicine, particularly cancer thermotherapy. Metal nanoparticles, most notably gold, are injected into the tissue to improve thermal efficiency, control the heated area, and uniform heat distribution. The main objective of this PhD project is to investigate the possibility of locally improving heat transfer to the environment by using heterogeneous nanoparticles, precisely gold core nanoparticles with an amorphous/crystalline silicon or silica coating.

Singlet Oxygen Generation by Atomically Precise Metal Nanoclusters for Biomedical Applications

Hao Yuan

Institut Lumière Matière / SPECTROBIO

The generation of highly reactive singlet oxygen ($^1\text{O}_2$) with photosensitizers (PS) plays an important role in various applications such as photodynamic therapy (PDT) for cancer, antibacterial agents, oxidation catalysis, water treatment, etc. Atomically precise metal nanoclusters, molecular-like nanostructure with discrete energy levels presenting long photoexcited lifetime, surface biofunctionality, good biocompatibility, and strong NIR excitation efficiency, has been ideal PS for $^1\text{O}_2$ generation. We tried to reveal structure- $^1\text{O}_2$ generation activity-application relationship, which can give support to predicting, designing, developing “better” PS based on nanoclusters.

Étude expérimentale et simulation numérique de concentration de contrainte dans les cristaux

Antoine OLLIVIER

Modélisation de la Matière Condensée et des Interfaces (MMCI)

Nous développons une nouvelle méthode pour mesurer les champs de déformation en surface d'un matériau sous contrainte. Elle consiste à suivre individuellement des nanoparticules au cours d'un essai de traction sur des images successives prises au microscope électronique à balayage. Le déplacement relatif des nanoparticules nous donne alors le champ de déformation. Cette méthode sera appliquée au cas de la fragilisation par hydrogène et également à celui de la fragilisation par irradiation. Les résultats obtenus seront comparés avec ceux issus de simulations numériques de dynamique des dislocations.

Imagerie des contraintes à l'échelle nanométrique à l'aide de nanocristaux fluorescents

Leila Issoufou Alfari

Liquide et interface & Luminescence

La caractérisation mécanique des polymères tels que les adhésifs sensibles à la pression par imagerie confocale permet d'ouvrir de nouvelles perspectives en termes de compréhension de leur comportement mécanique à l'échelle nanométrique. Le suivi de l'essai mécanique par microscopie confocale permet de visualiser, à l'aide d'émetteurs fluorescents, une tranche nette à l'intérieur de l'échantillon et par combinaison de plusieurs tranches, la reconstitution 3D de celui-ci sous différentes contraintes. Les émetteurs fluorescents mis en œuvre sont des nanoparticules ayant comme avantage une bonne résistance à la température, au photoblanchiment et une capacité d'excitation simultanée de particules avec des longueurs d'onde d'émission différentes.

Laser / Nanoparticles interaction

Mehdi FAWAZ

Luminescence team

Convection, conduction and radiations are three ways heat transfers occur : on the beach, your feet feel the warm sand by conduction, the fresh air relieves you by convection, and the sun gets you tanned by radiation. These phenomena are well understood and modeled by now, but what happens when you study energy exchanges at... the scale of a nanoparticle ? Let me introduce you to my experiment, aimed at observing nanoparticles excited by a pulsed laser.

Applications of chelating biopolymers in the context of chronic inflammation related to oxidative stress

Arthur Durand

Équipe FENNEC

The role of metals in inflammation has been clearly established: through Fenton reactions and macrophage polarization, iron or copper overload promotes pathways that lead to inflammatory responses. The use of a chitosan functionalized with DOTAGA and/or DFO can combine both advantages of biopolymer and chelators: while chitosan enables a biocompatibility and a biodegradability of the drug, the addition of DOTAGA makes it possible to sequester metals and prevent their harmful effect. These polymers have already shown promising applications for the treatment of different manifestations of inflammation; they constitute a real platform for further functionalization with other compounds or release of drugs.

Brillouin Light Scattering to probe molecular crowding in cells

Lucie Vovard

BioPhysique

Molecular crowding (MC) refers to the concentration of different components inside the cell. MC controls biomechanical (viscosity) and biomolecular (protein folding, ...) properties which when altered can lead in multiple disease. We simulate changes in MC using osmotic shocks that draw the water out of single cells. We probe cells with Brillouin Light Scattering (BLS) before and after shocks. BLS relies on the interaction of a laser with spontaneous density fluctuations in the sample that reveal intermolecular interactions. With this technique we observe non-linear mechanical behaviors at high osmotic pressures.

Nouvelle méthode de caractérisation et de datation du mortier de chaux

Nicolas HERREYRE (ArAr et iLM)

SPECTROBIO

La datation radiocarbone du mortier de chaux rencontre depuis plus de 50 ans des obstacles à la production d'âges fiables, notamment à cause de la présence de carbonates de calcium avec une fraction de CO_2 différente de celle incorporée lors de la prise du mortier. Une caractérisation précise de ce matériaux complexe est de fait nécessaire afin d'identifier et séparer le carbonate d'intérêt des contaminants à la datation. On se propose dans ce contexte d'employer l'imagerie LIBS et l'IA afin de déterminer sur une section de mortier la bonne phase à extraire au moyen d'une ablation laser, permettant de collecter le carbone pour la datation radiocarbone.

Formulation de peptides et développement d'un nouveau système de délivrance pour le traitement de pathologies neurotraumatiques et de troubles neurocognitifs

ROSSON Elise

FENNEC

En France, on estime à 15 000 le nombre d'accident vasculaire cérébral (AVC) par an. Ces lésions sont irréversibles.

Pendant le développement du fœtus, un petit organe nommé organe sous-commisural (SCO) sécrète une protéine, la SCO-spondine. Cette protéine régresse après la naissance et devient vestigial à l'âge adulte.

Cette protéine et ses peptides dérivés appelés NX ont montré des activités favorisant la neuroprotection et la neurorégénération.

Cette thèse sera concentrée sur deux grands axes d'études : le premier, concerne l'amélioration de la formulation actuelle du peptide.

Le deuxième axe, concerne le développement d'un nouveau système de délivrance du peptide en modifiant la formulation et la voie d'administration.

Physics of regeneration, Mechanobiochemical coupling, experiments and modeling.

Thomas Perros

Biophysics team

My work focuses on the study of the role of physical stimuli on the regeneration of organisms as part of the growing field of mechano-biology. For this purpose, the *Hydra vulgaris*, a freshwater polyp capable of completely reforming every excised part of its body, is used as a model organism. Each cut pieces of hydra rearrange themselves into actives spheres under tensions that lead them to spontaneously break their symmetry and pursue the rest of their regeneration. This study involves the use of microfluidic and molecular biology tools to firstly fully characterize the rheology of these pieces and then to quantify the update of the reaction system diffusion in play after application of mechanical stress.

Congélation de bulles dans un liquide.

Bastien ISABELLA

Liquides & Interfaces

L'objectif de ce sujet est d'observer in situ, et par microscopie confocale à fluorescence, les comportements de bulles d'air ou de gaz lors de la congélation. Plus particulièrement les dynamiques d'incorporation de ces bulles au niveau des front de solidification de l'eau mais aussi des phénomènes de nucléation, de coalescence, de diffusion pouvant y être lié sont étudiés. L'impact de la vitesse du front de solidification, du gradient de température ou encore de la présence de tensioactifs sur ces comportements seront aussi abordés.

Etudes expérimentales des interactions entre fibres de verre micrométriques

Bouvier Sacha

Equipe Liquide et Interface

La laine de verre est sollicitée mécaniquement au cours de sa fabrication et de son installation et les interactions à l'échelle de la fibre vont donc avoir un impact sur le procédé ainsi que sur les propriétés finales du produit. De plus, ces fibres sont généralement recouvertes d'additifs. La quantité et la nature de ces additifs sont également des paramètres ayant un impact sur le frottement entre fibres et l'éventuelle présence de ponts capillaires. De plus, de l'eau peut être présente dans le et pourrait réduire la mobilité des contacts entre fibres. Des expériences microscopiques de frottement et d'adhésion seront mis en œuvre lors de ma thèse pour mieux caractériser ces interactions entre fibres.

Développement de guides d'onde à gain par décollement de couches déposées par laser pulsé

Antoine Bernard

Matériaux et Nanostructures Photoniques (MNP), Photoluminescence

La création de systèmes optiques intégrés actifs est cruciale pour la réalisation d'amplificateur ou de laser sur puce. L'alumine dopé terre rare est un matériau prometteur pour ces tâches, grâce à sa large bande spectrale de transparence et à sa bonne insertion des terres rares dans sa matrice. Sa structuration avec les méthodes conventionnelles d'optique intégrée nécessite une gravure donnant de mauvaises qualités optiques à la structure. Ce travail porte sur une nouvelle méthode combinant déposition par laser pulsé et décollement à l'acétone pour réaliser ces structures sans gravure.

Réalisation d'un canon à électron sur puce

Rouillé Goulven

Physique des nanostructures et émission de champ

Ce sujet de thèse s'inscrit dans un projet porté par le C2N, l'iLM, TRT ainsi que le LPS. Ce projet, nommé OFELIA, a pour objectif de développer un laser à électron libre sur puce. Ce laser sera composé d'un canon à électron dirigeant un faisceau au sein d'un canal traversant un cristal photonique. Le but étant que les électrons du faisceau produisent un effet Tcherenkov en traversant le cristal photonique.

Au sein de ce projet, mon travail porte sur la réalisation du canon à électron (simulations, fabrication et enfin caractérisation).