

Numéro spécial
RECHERCHE

Science des **Matériaux**

Newsletter iMAT #5

La revue de l'institut de science des matériaux - Novembre 2022

Editeur : Institut de Science des Matériaux

Contact : emmanuel.sautjeau@sorbonne-universite.fr

Site : <https://materiaux.sorbonne-universite.fr/>

Twitter : @iMAT_SorbUniv

LinkedIn : <https://www.linkedin.com/company/materiaux-sorbonne-universite>

Science des Matériaux

Newsletter iMAT #5

La revue de l'institut de science des matériaux - Novembre 2022

LA VIE DE L'INSTITUT

P. 5 APPELS À PROJET DE RECHERCHE

P. 6 ACTUALITÉS HIVER - PRINTEMPS 2022

RECHERCHE INTERVIEW

PROJETS DOCTORANTS AAP2022

Entretiens avec les porteurs de projets

P. 8 Juliette Blanchard - *Cycleable & cheap catalysts for hydrogen storage and release by organic liquids*

P. 10 Natacha Krins - *Insertion Material for (Photo)Catalytic Hydrogen Production*

P. 12 Guillaume Jeanmairet - *Computing RedOx properties in Solution*

P. 14 Johan Biscaras - *2D/0D Heterostructure for IR Light Absorption/ Detection*

RECHERCHE INTERVIEW

PROJETS DOCTORANTS AAP2021

Entretiens avec les doctorants

P. 17 Sakina Meftah - *Investigation of nanoparticle size effect on the properties of nano-reinforced polymers*

P. 18 Gauthier Rosé - *Comprehensive Study of Polymeric Materials in Ancient Paintings by a Multimodal Analysis*

P. 19 Juan Pintor - *Iron Oxides under extreme pressure and temperature condition for planetary interiors*

P. 20 Octave Duros - *Investigation of the crystal field in rare-earth titanate pyrochlores by resonant inelastic x-ray scattering*

P. 21 Charlie Kersuzan - *Nanocrystal-based micro-lasers for biological sensing*



PLa vie de l'institut de Science des Matériaux

Les appels à projets
Les actualités d'iMAT

Appels à projets : point sur les AAP 2023, résultats AAP2022 postdocs

Appels à projets 2023 doc et postdocs

Les prochains appels à projets pour les financements de contrats doctorants et post-doctorants concerneront les deux axes de recherche ci-dessous :

- Défis et recherche fondamentale
- Méthodes, techniques et instrumentation

L'AAP doc sera lancé au mois de janvier 2023 par l'Institut de Formation Doctorale. Le laps de temps entre l'annonce officielle et le dépôt des projets étant court, vous pouvez dès à présent discuter et monter vos projets.

Le [site web](#) vous fournit des conseils et des réponses aux demandes les plus fréquentes concernant le montage de projets (collaborations, nombre de projets par laboratoires, critères de sélection, etc.)

Résultats Appels à projets 2022 postdocs

L'institut a reçu 12 projets de recherche doctorants dont 9 émanant de la Faculté de Sciences & Ingénierie de SU et 3 de l'UTC. Le comité direction d'iMAT a apprécié la qualité globale des projets soumis et remercie les porteurs de différents projets pour leur travail.

Projets retenus :

Titre : *Tuning electrOnic ProPerties In Nanoparticles of Gold – TOPPING.*

Porteurs de projets : Anna Levy, Gregory Cabailh (INSP, SU), Christophe Methivier (LRS, SU).

Titre : *Synthèse et biodégradation de polymères biosourcés à partir de dérivé d'acide oléique.*

Porteurs de projets : Philippe Guegan (IPCM, SU) / Frederic Delbecq (TIMR-UTC).

Les actualités principales de l'institut de science des matériaux courant 2022

Evaluation mi-parcours

iMAT a rédigé un rapport d'activité à mi-parcours (le mandat courant est de 2020 à 2023). Le rapport que vous pouvez consulter a été présenté le 10 octobre dernier au comité de pilotage de l'Alliance Sorbonne Université.

Soutiens aux évènements

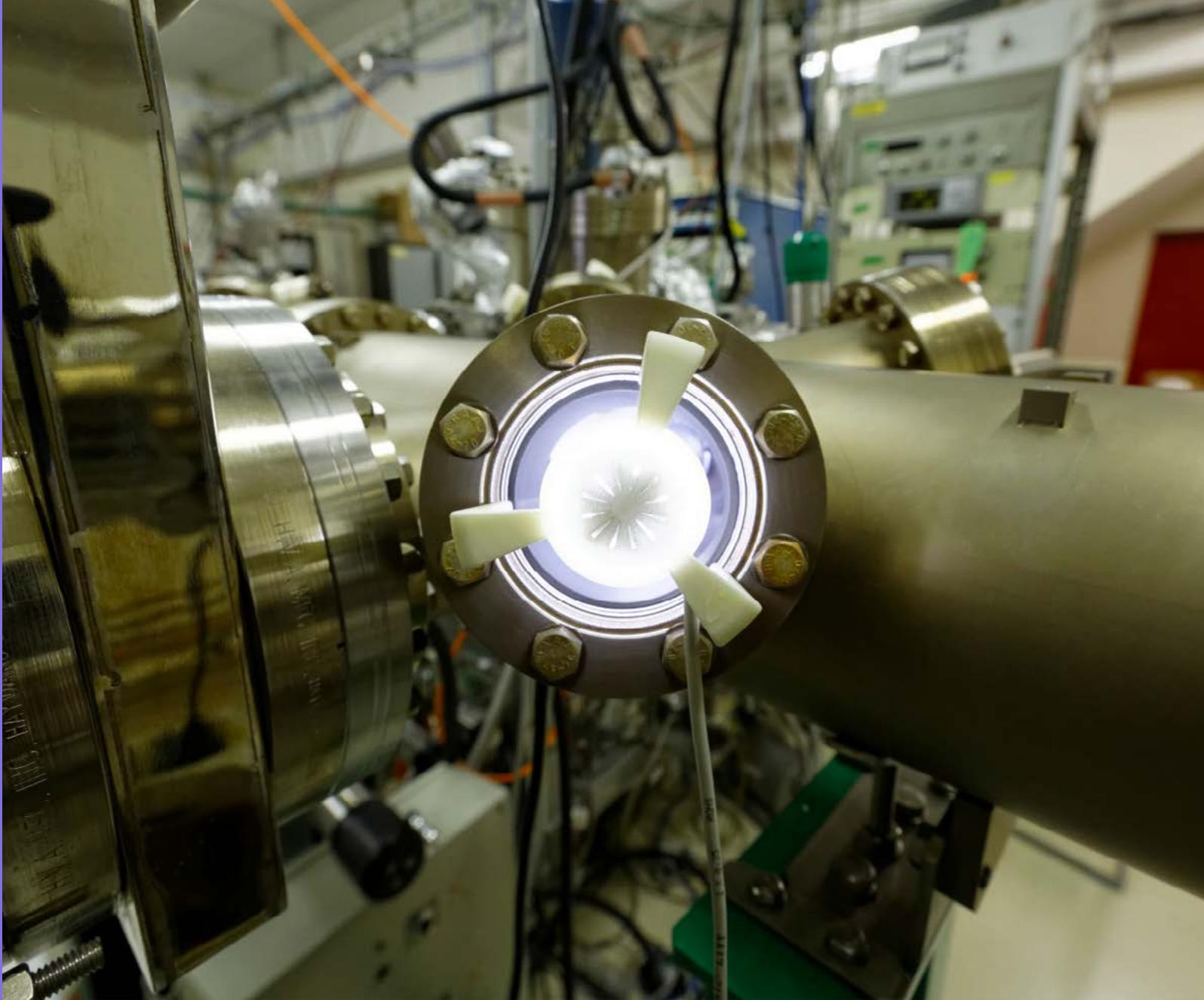
- *Les Journées XRD*, 17 – 19 mai 2022
- *11th International Conference on Highly Frustrated Magnetism 2022*, 20 – 25 juin 2022
- *ISBB2022, International Symposium on Boron, Borides and related materials*, 5 – 9 septembre 2022
- *Les journées du GDR Nanoscience en champ proche sous ultra vide*, 22 – 24 novembre 2022
- *Les journées de lancement du GDR NINO - Nanostructures inorganiques par chimie en solution*, 14 – 16 décembre 2022

Séminaires de formation iMAT Matériaux, recherche, innovation

Le cycle annuel de séminaires *Matériaux, recherche, innovation* a eu lieu du 11 février au 25 mars avec 114 inscrits, dont 50 doctorants. Les conférences ont réuni en moyenne une cinquantaine de participants pour des séminaires de 1h30 (conférence et échange compris). Cette formation a permis de valider un total de 370 heures de formations obligatoires auprès des 5 Écoles Doctorales partenaires.

Ecole thématiques

- *PISACMS 2022*, 29 août- 2 septembre 2022, organisé par A. Marco Saitta et R. Vuillemier
- *Ecole Rayonnement Synchrotron pour l'étude des Matériaux*, 28-30 Juin 2022, organisée par M. d'Angelo et A. Juhin.
- *Ecole d'été sur les Matériaux : Innovation et Durabilité* à Sèmè City, Cotonou, Bénin, 18-23 Juillet 2022, organisé par A. Shukla et M. Gerard pour iMAT et S. Bonou et T. d'Almeida pour Sèmè City.



Projets lauréats AAP2022 contrats doctorants

Entretiens porteurs de projets :

Juliette Blanchard, Natacha Krins,
Guillaume Jeanmairret
et Johan Biscaras

Les défis scientifiques du transport et du stockage de l'hydrogène bas carbone.

Le stockage et le transport d'hydrogène sont deux grands défis à relever pour la nécessaire transition environnementale à venir.

Juliette Blanchard du LRS pilote un projet ambitieux de transport et de stockage de l'hydrogène en collaboration étroite entre l'IPCM et MONARIS.

Pourquoi vous intéressez-vous au transport et au stockage de l'hydrogène ?

L'hydrogène comme source d'énergie est l'une des clés du développement de l'économie bas carbone mais son stockage et son transport constituent des verrous techniques à lever pour développer efficacement son utilisation. En effet son stockage sous forme liquide (à très basse température) ou sous forme comprimée (jusqu'à des pressions de 700 bars), sont coûteux, complexes et comporte un certain danger. L'utilisation de liquides organiques porteurs d'hydrogène (LOHC, pour «Liquid Hydrogen Carrier») est probablement l'une des solutions les plus attrayantes pour lever ce verrou technique : les LOHC sont des composés organiques capables d'absorber et de libérer une fraction massique élevée d'hydrogène par des réactions chimiques, ce qui rend possible le stockage et le transport d'H₂ dans des conditions ambiantes (par exemple en utilisant les pipelines existants, voir figure).

Quel est le projet de recherche ?

Avec ce projet, nous visons à développer l'utilisation de transporteurs d'hydrogène organique liquide (LOHC) émergents basés sur des composés contenant de l'azote^{1,2}, et plus précisément des paires amine primaire/nitrile, en commençant par une alkylamine modèle telle que l'oléylamine (pour laquelle une activité dans la déshydrogénation des NPs de cobalt a déjà été établie par certains d'entre nous) et en s'étendant aux diamines/dinitriles telles que la paire 1,5-diaminopentane/1,3-dicyanopropane (qui remplit les exigences du LOHC^{4,5}).

Un deuxième but à atteindre sera de développer de nouveaux catalyseurs abordables financièrement, efficaces sur le plan énergétique et cyclables, basés sur des nanoparticules bi-métalliques de cobalt, de nickel et de fer, soit colloïdales, soit supportées sur un matériau de silice, afin d'augmenter leur stabilité et leur cyclabilité.

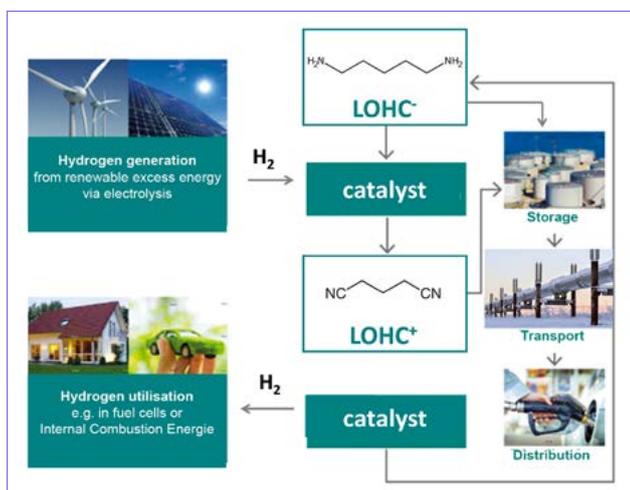
Quelles applications envisagées ?

Le projet se situe dans le champ de la recherche fondamentale : il a pour but d'établir une preuve de concept dans l'utilisation de la paire diamine/dinitrile comme LOHC et d'identifier des catalyseurs bon marché pour déshydrogéner/hydrogéner ces molécules dans des conditions de température suffisamment douces pour qu'une utilisation de ces molécules et de ces catalyseurs soit par la suite envisageable.

Comment s'est montée le partenariat avec l'autre laboratoire ou équipe ?

Le projet repose sur l'expertise de 3 équipes :

- Le laboratoire MONARIS (Christophe Petit) est chargé de la préparation des particules colloïdales bimétalliques qui serviront de catalyseurs.



Le stockage et le transport de l'hydrogène par le système Liquid Organic Hydrogen Carrier (LOHC)

Porteurs de projet :

Juliette Blanchard

(Laboratoire de Réactivité de Surface)

Christophe Petit

(De la Molécule aux Nano-objets : Réactivité, Interactions et Spectroscopies)

Marc Petit

(Institut Parisien de Chimie Moléculaire)

Doctorant :

Mathieu Delomme (École Doctorale Physique et chimie des matériaux)

- L'IPCM (Marc Petit) pour l'évaluation des activités catalytiques en hydrogénation et déshydrogénation
- le LRS où je m'intéresse en collaboration avec Souhir Boujday à l'immobilisation des particules métalliques sur des supports silices pour stabiliser les particules colloïdales et favoriser le recyclage du catalyseur.

La collaboration entre ces trois équipes va nous permettre principalement de gagner du temps vu qu'elles arrivent déjà avec leurs expertises et savoir-faires respectifs : c'est cette forte complémentarité dans les compétences qui va nous faire avancer vite.

Votre projet est lauréat dans l'appel à projet doctorant. Comment s'est passé le recrutement ?

Le sujet de thèse a été publié sur le site web et le compte LinkedIn de l'école doctorale Physique et Chimie des Matériaux ; il a également été relayé par d'autres laboratoires. Suite à une première sélection sur dossier et des auditions (3 postulants auditionnés sur 17) le jury (constitué de la directrice de l'ED 397, Nadine Witkowski, d'un représentant de l'Institut de Science des Matériaux, Abhay Shukla, et des porteurs du projet) a sélectionné, en juin, un premier candidat qui s'est malheureusement désisté mi-juillet. Heureusement, nous avons pu trouver rapidement 4 candidats, recommandés par des collègues, les auditionner et sélectionner l'un d'entre eux avec l'accord du jury.

S'il y a eu des difficultés, quelles sont-elles ? et pourquoi ?

Globalement, nous avons trouvé que le calendrier était un peu trop serré. Il faudrait avoir la réponse concernant le financement un peu plus tôt pour se laisser plus de temps pour sélectionner le candidat. Le projet qui sera développé par le doctorant né-

cessitant des compétences multiples, il n'était donc pas question de trouver un candidat qui les rassemble toutes.

Quels sont les plus d iMAT selon vous ?

Le fait de proposer des projets sur des thématiques très ciblées, ce qui permet de tout de suite savoir si on peut déposer un projet ou pas ; la rapidité et la simplicité du processus sont également deux points très positifs.

Pourquoi avoir répondu à l'AAP de iMAT plutôt qu'un autre ?

Cet appel à projet est une réelle opportunité pour nous puisqu'il nous permet de lancer cette collaboration et que nous pourrions ensuite nous appuyer sur les premiers résultats obtenus dans le cadre de cette thèse pour demander un soutien financier à d'autres organismes (par exemple à l'ANR ou à des collaborateurs industriels)

Quel est selon vous le bénéfice/les avantages que pourrait vous apporter l'institut ?

Le fait que ce projet ait été soutenu par l'Institut de Science des Matériaux est un atout : il apporte une caution scientifique supplémentaire. Et je pense que l'Institut pourrait également nous permettre d'accroître la visibilité de ce projet.

Projet : *Cycleable & cheap catalysts for hydrogen storage and release by organic liquids.*

Caractérisation de matériau d'insertion pour la production photocatalytique d'hydrogène.

Natacha Krins porte ce projet doctorant lauréat de l'appel à projet iMAT 2022. Cette collaboration entre le LCMCP et le LISE ambitionne d'obtenir une caractérisation pointue des espèces échangées, des propriétés optoélectriques et de la quantité d'ions insérés du matériau d'insertion TiO_2 .

Bonjour Natacha, vous êtes porteuse d'un projet lauréat du dernier appel à projet doctorant d'iMAT. En quoi consiste cette recherche ?

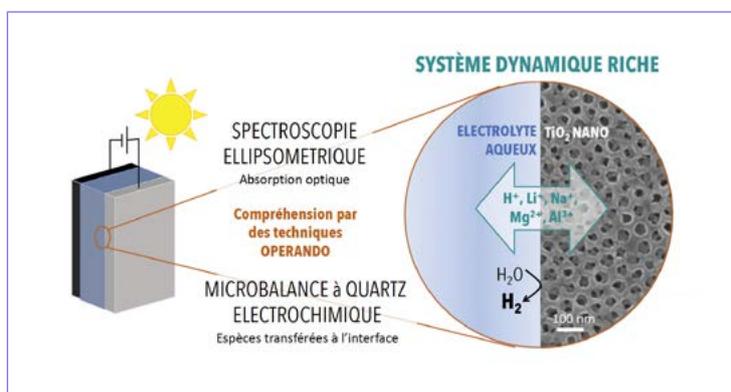
Notre recherche ambitionne d'explorer et de caractériser la modification des propriétés optiques et électroniques d'un matériau qui peut insérer des cations tels que des protons, des ions sodium ou des ions lithium en modifiant l'état d'oxydation de son métal de transition. Ces matériaux constituent le cœur de la technologie des batteries Li-ion et ils ne sont pourtant que très peu explorés pour des applications qui faciliteraient par exemple la production électrochimique d'hydrogène à partir d'eau. La richesse du matériau d'insertion réside dans le nombre infini de compositions accessibles en modifiant simplement la quantité de cations insérée électrochimiquement et/ou la nature des cations présents dans l'électrolyte, qui peut être multiple. Ce projet a d'ailleurs la particularité par ses caractérisations *operando* des espèces échangées aux interfaces, d'identifier avec précision la nature des espèces insérées ainsi que ses propriétés optoélectroniques.

Nous avons choisi de travailler avec des nanomatériaux pour augmenter la quantité de ces interfaces d'échange et la vitesse de transport des espèces insérées. TiO_2 est le matériau d'insertion sélectionné car il est largement utilisé en industrie mais il n'a pas encore livré toute sa richesse et sa complexité. Par ailleurs, mais aussi très largement controversé et notre apport de compréhension de son comportement

dans des milieux aqueux aussi riches que des milieux type marin pourrait éclairer certains comportements inattendus et potentiellement écotoxiques du TiO_2 . Notre projet vise donc une communauté plutôt large, de celle des (photo)catalyseurs à celle des réflexions sur la nanotoxicité.

Parmi les critères dominant de sélection, l'interdisciplinarité et la collaboration entre laboratoires sont généralement au cœur des projets de recherche soutenu par l'institut.

La dimension interdisciplinaire touche effectivement à la variété des domaines concernés par l'étude de nanoparticules de TiO_2 à l'interface avec un milieu aqueux enrichi en sels. Rémi Gaultier, le thésard qui portera ce projet, travaillera avec trois équipes : l'équipe RMES du LCMCP qui s'occupera de la synthèse et de la (photo)-électrochimie des films de nano- TiO_2 et étudiera les milieux aqueux électrolytiques intéressants et les gammes de potentiel pertinentes ; l'équipe NANO du LCMCP qui possède l'expertise de l'ellipsométrie *operando* qui donnera accès aux caractéristiques optiques des films ; et le LISE qui est spécialiste des expériences *operando* de spectroscopie d'impédance électrochimiques couplées à des mesures de balance à quartz (EQCM).



Les mesures ellipsométriques et EQCM donneront donc accès à la nature des espèces échangées et aux propriétés optoélectroniques du film inséré, ces informations complètent joliment celles de la

Porteurs de projet :

Cédric Boissière

(Laboratoire de Chimie de la Matière Condensée de Paris)

Hubert Perrot

(Laboratoire Interfaces et Systèmes Electrochimiques)

Natacha Krins

(Laboratoire de Chimie de la Matière Condensée de Paris)

Doctorant :

Rémi Gauthier

(École Doctorale Physique et chimie des matériaux)

quantité d'ions insérés et la mise en évidence de réactions (insertion et formation d'hydrogène/d'oxygène) déjà fournies par l'électrochimie. Les manipulations EQCM et ellipso *operando* ne sont néanmoins pas des manipulations de routine, le travail purement électrochimique de présélection des milieux et conditions intéressantes est donc crucial.

Comment s'est passé le recrutement de Rémi ?

Nous avons reçu une quinzaine de candidatures, dont une dizaine que nous avons interviewé pour finalement en retenir 5 pour l'audition devant le jury de l'École Doctorale et d'iMAT. A l'issue de la sélection, 3 candidats ont été classés. Le dernier choix parmi ces 3 n'a pas été facile car chaque candidat-e possédait des qualités complémentaires :

- une expérience expérimentale pointue des caractérisations électrochimiques type batterie ;
- une énergie fraîche et une envie de découvrir de nouveaux sujets d'études ;
- une maîtrise des matériaux, un sérieux et une persévérance à toute épreuve.

Ces qualités étaient toutes essentielles pour mener à bien ce travail de thèse. Rémi est le sérieux, l'expert des matériaux, celui sur qui on peut compter sans crainte, d'autant qu'il a fait son stage de M2 dans l'équipe RMES du LCMCP. Dans ce travail, il faudra une dose d'ouverture et de sensibilité vu la large communauté touchée et la difficulté de sélectionner les systèmes d'intérêt dans la multitude des possibilités.

Mais il faut aussi une bonne dose de courage pour s'attaquer aux cellules *operando* et aux modèles théoriques qui soutiennent les deux techniques d'ellipsométrie et d'EQCM. Rémi a les épaules pour, c'est une valeur sûre.

Pourquoi pensez-vous avoir obtenu ce soutien de l'institut ?

iMAT a su accueillir le projet avec enthousiasme et y déceler toute la richesse du matériau d'insertion derrière l'apparente simplicité du système : nanos de TiO₂ dans une solution aqueuse enrichie en sels. Le fait que les communautés visées par ce projet soient à l'opposé du spectre (développement d'énergie renouvelable et questionnement de la nano dans les environnements marins) exigeait l'oreille interdisciplinaire d'iMAT. La complexité et la complémentarité des techniques de caractérisation *operando* rendent aussi ce projet extrêmement pointu et stimulant techniquement pour toute la communauté des matériaux.



Hubert Perrot, Natacha Krins, Cédric Boissière

Projet : Insertion Material for (Photo)Catalytic Hydrogen Production (IMatH2).

Développement d'un modèle hybride pour simuler l'action d'un solvant sur un soluté quantique.

Guillaume Jeanmairet du laboratoire PHENIX est spécialiste des simulations de solvatation par l'utilisation de fonctionnelles. Il porte un projet en collaboration avec le LCT pour développer une modélisation hybride qui allie les descriptions quantiques et classiques d'un système RedOx.

Nous présentons dans ce numéro les derniers projets de recherche doctorants soutenus par iMAT. Dans quel champ de recherche vous situez-vous ?

Notre projet de recherche se déploie dans le champ de la simulation. Nous avons pour ambition de croiser deux méthodes de modélisation, l'une de chimie quantique et l'autre de physique statistique, pour modéliser l'effet d'un solvant sur les propriétés d'un soluté.

Pour décrire un tel système, les simulations quantiques sont les plus exactes mais nécessitent une masse de calcul très importante pour un système complexe, ce qui les rend très onéreuses. Pour un système solvant / soluté, le soluté est décrit généralement par un modèle quantique et le solvant par

qui permet de garder une description de la nature moléculaire avec un coût comparable aux méthodes utilisant un continuum.

Quelle est l'originalité de votre simulation classique ?

Généralement, il y a deux méthodes de modélisation classique de ce type de système : soit des modèles Monte-Carlo, soit des dynamiques moléculaires. Ce sont deux méthodes qui consistent à générer énormément de configurations différentes du système étudié, jusqu'à plusieurs millions parfois, puis de procéder à des calculs de moyennes statistiques pour en tirer les propriétés observables. L'inconvénient de ces méthodes, c'est qu'elles restent encore onéreuses : pour que la moyenne ait du sens, il faut avoir



des simulations classiques des forces : cela permet de réduire le coût des simulations même si celui reste important. Une alternative est de décrire le solvant par un modèle continu ce qui accélère considérablement les calculs mais ceci se fait au détriment de la précision puisqu'on perd la nature moléculaire du solvant.

Notre modèle hybride se situe dans une zone intermédiaire. On décrit toujours le soluté RedOx par une méthode quantique alors que le solvant est lui décrit par une méthode héritée de la physique des liquides

généralisé énormément de configurations, ce qui est gourmand en temps humains et en temps de calculs.

La méthode que nous voulons coupler est une méthode alternative qui permet de caractériser avec beaucoup d'efficacité et peu de calcul le comportement d'un solvant : on ne génère pas des myriades de configurations pour faire des moyennes mais on établit une fonctionnelle, qui dépend de la densité du solvant. Cette fonctionnelle une fois minimisée fournit la structure du solvant et ses propriétés énergétiques. Les ordinateurs sont hyper efficaces pour

Porteurs de projet :

Emmanuel Giner

(Laboratoire de Chimie Théorique)

Guillaume Jeanmairat

(Physicochimie des Électrolytes et Nanosystèmes interfaciaux)

Mathieu Salanne

(Physicochimie des Électrolytes et Nanosystèmes interfaciaux)

Doctorant :

Maxime Labat

(École Doctorale Chimie physique et chimie analytique de Paris)Centre)

ce type de calcul : cette méthode est donc beaucoup plus économe en temps humain comme en temps machine. Typiquement sur des modèles classiques, utiliser cette méthode permet d'être 1000 fois plus rapide en termes de temps de calculs.

Notre méthode devrait permettre de manière assez précise d'être beaucoup plus efficace et de prendre en compte le solvant dans des calculs de chimie quantique.

Comment vous est venu cette idée de méthode hybride ?

C'était déjà le sujet de ma thèse : il était naturel pour moi de croiser cette méthode avec une méthode quantique. Si la simulation marche, elle sera rapide, efficace et permettra de regarder la solvatation en prenant en compte le solvant dans les calculs quantiques sans de grandes dépenses de calcul.

J'ai déjà reproduit ce croisement l'an dernier avec la méthode de simulation quantique DFT électronique : les résultats étaient positifs et j'ai pu publier. Mais j'ai alors perdu beaucoup de temps à comprendre et modifier le code qui m'était étranger. Ça m'a néanmoins fourni une preuve de principe qui m'a permis de solliciter Emmanuel Giner du LCT pour l'associer à mon projet : il développe son propre code de structure électronique.

Emmanuel Giner et moi nous nous connaissons depuis longtemps : il s'est installé dans le bureau que j'occupais quand je suis parti en postdoc en Allemagne. Avec le temps et vu nos spécialités, nous envisageons depuis un moment cette collaboration.

C'est un projet de recherche doctorant : comment s'est passé le recrutement ?

Nous avons passé l'annonce dans un réseau d'experts, le Réseau de Chimie Théorique Francophone, ainsi que sur LinkedIn. Nous avons présélectionné 6 candidats à qui nous avons soumis mon article sur la preuve de principe. Nous avons pu réduire la liste à 3 candidats pour finalement choisir Maxime Labat : c'est lui qui avait le plus d'expérience et de curiosité pour notre projet.

Par contre le timing nous a semblé trop serré : après la joie de l'annonce, il a fallu chercher un candidat en un mois, c'est vraiment très court.

Pourquoi présenter à iMAT ? Et que pourrait vous apporter l'institut de plus que d'autres structures ?

J'avais déjà présenté un autre projet l'an dernier. Fort de la publication de mon dernier article, j'ai voulu profiter de cette expérience pour lancer cette collaboration. L'institut nous a particulièrement aidé pour la sélection du candidat : le fait que des représentants de l'ED et d'iMAT participent nous a conforté dans notre choix ; forts de leur expérience ils nous ont conseillé avec beaucoup de bienveillance. Et puis notre projet de modélisation hybride gagnera en visibilité dans la communauté de science des matériaux en étant porté par un institut thématique de l'Alliance Sorbonne Université.

Projet : Computing RedOx properties in Solution (CREPS).

Combiner le meilleurs des matériaux 2D avec les propriétés optiques des nanocristaux.

En raison de leur caractéristiques tout à la fois exceptionnelles et inhabituelles, les matériaux bidimensionnels connaissent de nombreuses recherches et applications. **Johan Biscaras** porte un projet en collaboration avec l'INSP pour explorer leur potentiel dans le domaine du photovoltaïque.

Bonjour Johan. Vous êtes lauréat d'un projet doctorant financé par l'institut. En quoi consiste votre recherche ?

Le projet vise à développer une nouvelle génération de composants optoélectroniques qui combinent le meilleur des matériaux bidimensionnel (constitués d'une unique couche d'atome ou de molécules), en particulier en termes de transport, avec les propriétés optiques infrarouges des nano-cristaux.

Nous nous sommes fixés deux objectifs :

- L'objectif premier est de démontrer la sensibilisation à la lumière du matériau 2D pour une énergie inférieure à sa bande interdite (la bande interdite détermine notamment le caractère isolant).
- Les matériaux 2D présentent globalement une faible absorption en raison de leur faible épaisseur : un deuxième objectif de ce projet est de résoudre ce problème grâce à l'introduction d'un résonateur de lumière qui améliorera l'absorption de la lumière.

Quelles caractéristiques vous intéressent dans les matériaux 2D ?

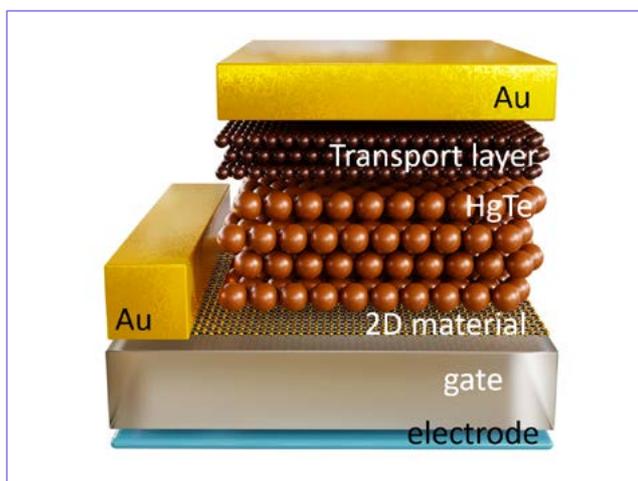
Depuis le graphène (une couche de graphite), la communauté scientifique a développé de nombreux autres matériaux dont les caractéristiques semi-conductrices sont exploitées pour des dispositifs électroniques et optoélectroniques d'épaisseurs nanométriques. Parmi de nombreuses propriétés

remarquables, les matériaux 2D sont facilement fonctionnalisables : on couple les matériaux 2D avec des molécules ou des nanoparticules déposées en surface, ce qui leur confère de nouvelles propriétés.

Différentes structures hybrides à base de graphène ont montré des caractéristiques intéressantes d'absorption optique et de gain photoélectrique grâce à l'adsorption de boîtes quantiques. Mais ces structures souffrent de nombreuses limitations, comme un fort courant d'obscurité (courant résiduel), intrinsèquement lié à l'absence de bande interdite du graphène. D'autres matériaux semi-conducteurs comme le disulfure de molybdène n'ont pas ce défaut.

Un autre aspect qui nous intéresse est la plage spectrale. Nous visons des longueurs d'ondes de 3 à 5 micromètres, ce qui correspond à une fenêtre de transparence atmosphérique : dans cette gamme, l'imagerie et la détection à

longue distance deviennent possibles.



Comment allez-vous procéder ?

Notre stratégie consiste à utiliser un matériau 2D à bande interdite intermédiaire tel que le sélénure d'indium. La valeur de la bande interdite est choisie de manière à ce que le courant d'obscurité soit réduit et en même temps facilite le transfert de charge depuis les nano-cristaux. Nous comptons utiliser des nano-cristaux de HgSe, qui présentent

Porteurs de projet :

Johan Biscaras

(Institut de Minéralogie, de Physique des Matériaux et de Cosmochimie)

Emmanuel Lhuillier

(Institut des NanoSciences de Paris)

Doctorant :

En cours de sélection.

une absorption intra-bande dans la gamme micro-métrique voulue.

La seconde partie du projet porte sur la conception d'un résonateur lumière-matière. Un premier aspect de la conception sera d'améliorer l'absorption de la lumière dans la gamme spectrale où les nano-cristaux absorbent. Une deuxième contrainte concerne la localisation spatiale de cette absorption. Nous cherchons à localiser l'absorption près de l'interface 0D/2D. Un tel mode électromagnétique peut être obtenu à partir de Fabry-Pérot planaire par exemple.

Comment s'est développée votre collaboration avec l'INSP ?

Emmanuel Lhuillier et moi nous connaissons depuis plus de 15 ans. Nous avons travaillé dans le même laboratoire, mais jamais sur les mêmes projets. Cependant, depuis quelques années nous avons remarqué une convergence de certaines de nos problématiques respectives, alors que nos domaines de recherches sont assez éloignés.

Pratiquement, cette collaboration combine le savoir-faire d'Emmanuel dans la synthèse de nano-cristaux et la fabrication de dispositifs optoélectroniques, et mon expérience sur le transport électronique dans les couches de matériaux 2D.

Comment se passe le recrutement ?

Le recrutement est toujours en cours, nous cherchons des candidatures !

Nous avons évalué 7 candidatures et auditionné 3 candidat.e.s avec le jury ED/iMAT.

Nous avons fait circuler l'annonce sur les sites de nos laboratoires, le site de l'école doctorale, à l'uni-

versité de Bologne (Italie), et sur les réseaux sociaux (Facebook, Linked-in). Nous avons placé la barre assez haute sur le recrutement.

Pourquoi avoir répondu à notre appel à projet ?

C'est assez simple : l'iMAT propose un important soutien financier à l'échelle de la faculté des Sciences et Ingénierie. Et par ces critères de sélection, l'appel à projet était une bonne occasion de mettre en avant ces problématiques en valorisant une collaboration équilibrée entre deux différents laboratoires : en effet, nos savoir-faire et équipements (transport, exfoliation pour l'IMPIC, nano-cristaux et salle blanche à l'INSP) sont très complémentaires, une vraie synergie est au cœur de ce projet.



Emmanuel Lhuillier, Johan Biscaras

Projet : 2D/0D Heterostructure for IR Light Absorption/Detection.



Projets lauréats AAP2021 Contrats doctorants

Entretiens avec les doctorants:

Sakina Meftah,
Gauthier Rosé, Juan Pintor,
Octave Duros et Charlie Kersuzan

«Les études sur les nanoparticules sont captivantes et constituent un sujet d'actualité en SdM.»

La recherche de **Sakina Meftah** est partagée entre le *Laboratoire Roberval* de Sorbonne Université et le laboratoire *De la Molécule aux Nano-objets : Réactivité, Interactions et Spectroscopies* de Sorbonne Université.



Les Pourquoi avoir choisi de postuler sur cette thèse ?

Les études sur les nanoparticules sont captivantes : c'est un sujet d'actualité dans l'étude des matériaux et de leurs comportements. J'ai eu la chance de travailler sur ce sujet au cours de mon stage de M2 : mon directeur m'a alors parlé d'une continuité de ce sujet de stage par une thèse de doctorat. J'ai cherché l'annonce sur le site de l'UTC (mon université de master) pour proposer immédiatement mon dossier de candidature.

En quoi consiste ton projet ?

Je travaille sur la synthèse des nanoparticules d'oxyde de fer par la décomposition thermique d'un précurseur organométallique avec un contrôle de taille, de forme et de chimie de surface. Nous voulons ensuite étudier les effets de ces nanoparticules sur les propriétés des polymères nano-renforcés (après leur incorporation dans la matrice polymères).

Comment est partagé ton temps de travail entre les deux laboratoires ?

La première année, je suis principalement affectée au laboratoire MONARIS de Sorbonne Université mais j'assiste aussi à des formations dispensées à l'UTC. A SU, je réalise la synthèse des nanoparticules d'oxyde fer et j'étudie leur mécanisme de croissance. A partir de février 2023 et si je le planning est respecté, je serai de retour à Compiègne pour étudier les polymères : j'élaborerai le polymère nano-renforcé avec les nanoparticules que j'aurais obtenu à SU, et je pourrai alors étudier les propriétés méca-

niques et thermique de ce nanocomposite élaboré. Ces matériaux modèles seront ensuite étudiés expérimentalement à l'échelle macroscopique et à l'échelle nanoscopique sur des lignes de synchrotron pour observer les changements des propriétés spécifiques du matériaux lorsqu'il est sollicité.

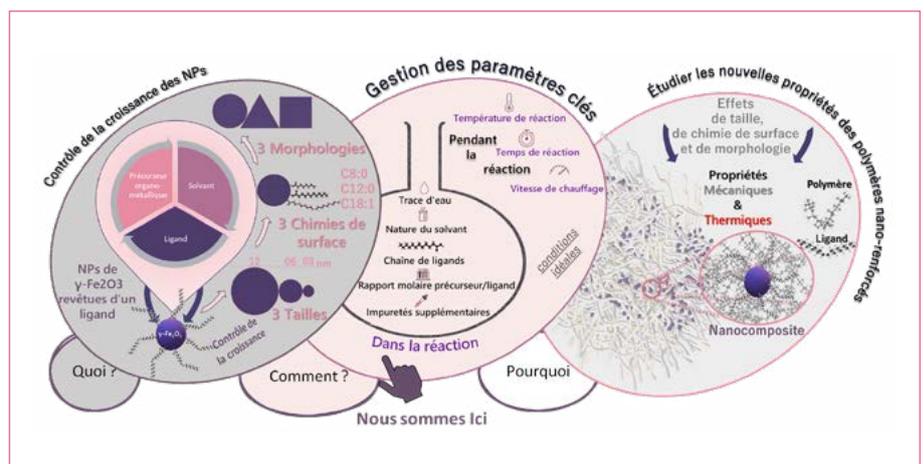
Quelles sont les perspectives aujourd'hui ?

Nos perspectives pour la fin de l'année sont la maîtrise globale de notre système de synthèse et la détermination de l'effet de chaque paramètre de synthèse sur la taille et la morphologie des nanoparticules : pour les incorporer dans le polymère nano-renforcé et en étudier les propriétés mécaniques, chimiques, physiques...

Comment se passe ta vie de jeune chercheuse ?

J'aime le travail d'équipe à Monaris. Je me suis facilement intégrée car l'entente et l'entraide sont excellentes entre les doctorant(e)s.

Nous tenons des réunions mensuelles avec mon directeur et mes codirecteurs de thèse et parfois avec d'autres chercheurs spécialistes dans un domaine différent pour apporter des réponses à certaines questions bien précises dans mes recherches.



Mieux interpréter les mécanismes du vieillissement des matériaux du patrimoine.

Le projet de recherche de **Gauthier Rosé** est co-porté par le *Laboratoire d'Archéologie Moléculaire et Structurale* et le *Centre de Recherche sur la Conservation*.

Comment décrirais-tu ton projet en quelques mots ?

Ce travail de recherche consiste en premier lieu à exploiter les capacités de la chromatographie gazeuse bidimensionnelle (Py-GC×GC/MS) pour améliorer la compréhension des analyses de spectrométrie de masse (TOF-SIMS) de matériaux du patrimoine : l'analyse par spectrométrie a maintenant atteint ses limites et nécessite de lui adjoindre une autre méthode puissante de séparation.

Comment allez-vous procéder ?

La première étape de mon travail consistera à analyser des échantillons de références de matériaux de peinture (des résines, des liants, ou encore des pigments) vieillis naturellement et artificiellement. Ces matériaux étalons seront analysés par spectrométrie puis par chromatographie : nous voulons ainsi affiner notre compréhension de la complexité des

spectres de masse obtenus en imagerie TOF-SIMS pour mieux appréhender et interpréter les mécanismes de vieillissement et d'altération au cours du temps.

Aujourd'hui nous sommes satisfaits de nos avancés, d'autant que nous sommes dans les temps sur notre planning de recherche : les analyses sur objets du patrimoine vont commencer sous peu, en parallèle de l'analyse des matériaux de référence.

Vous vous intéressez particulièrement aux liants organiques. Pourquoi ?

Les liants organiques, comme les cires ou résines, ont une place prépondérante dans l'étude patrimoniale de la peinture : ils sont témoins de l'histoire et de l'évolution de la technique d'un artiste, mais ils peuvent aussi être porteurs de ses intentions artistiques. Pour un historien comme pour un restaurateur, ils peuvent détenir/livrer des connaissances fascinantes.

Comment se déroule ta vie de jeune chercheur ?

Le projet est porté par deux chercheurs dans deux laboratoires différents : Alain Brunelle du LAMS et Michel Sablier du CRC. Je suis hébergé par le LAMS, mais je me rends régulièrement au CRC qui possède un des deux instruments. Mon quotidien de chercheur se déroule principalement au LAMS. Il y a de vrais échanges scientifiques entre collègues qui permettent d'enrichir notre recherche mais aussi les interprétations artistiques, indispensables et inestimables pour notre projet.



Spectromètre de masse par temps de vol TOF-SIMS IV (LAMS), qui fait partie de la plateforme de spectrométrie de masse MS3U

<https://www.plateforme-fsi-ms3u.com/>

«J'ai été immédiatement attiré par les composantes à la fois théoriques et expérimentales.»

Le projet de **Juan Pintor** est porté par l'*Institut de Minéralogie, de Physique des Matériaux et de Cosmochimie*, son travail de recherche est partagé entre deux équipes du même laboratoire.

Quelles sont les raisons qui ont motivé ta candidature pour ce projet ?

Les composantes à la fois théorique et expérimentale m'ont immédiatement intéressé. Ma vision de la physique est parfaitement en adéquation avec l'ambition de cette recherche : relever le défi expérimental qu'est la compression dynamique par choc laser en s'appliquant à comprendre et décrire théoriquement les phénomènes physiques associés. J'ai très vite proposé ma candidature à l'Institut de sciences des matériaux pour ce projet.

Au bout d'un an, où en est ta recherche ?

Au cours de cette première année, j'ai pu travailler avec Marion Harmand sur plusieurs grandes installations, à Stanford en Californie (LCLS), Hambourg en Allemagne (EuXFEL) et au LULI à Palaiseau. Nous avons pu effectuer nos expériences de choc laser comme prévu et participer activement au développement du spectromètre d'absorption X du CNRS à EuXFEL.

En parallèle, j'effectue des calculs et des simulations qui me permettent d'avancer sur la compréhension des structures atomiques et électroniques des oxydes de fer.

Aujourd'hui, j'ai le sentiment que nous avons bien avancé, avec un nombre important d'expériences effectuées. Il reste maintenant à mener un travail conséquent d'analyse de données qui est en cours, avec de beaux résultats qui devraient arriver prochainement.

Comment est partagé ton temps de travail entre modélisation et expérimentation ?

Une grande partie du temps de ma première année de thèse a été consacrée aux travaux expérimentaux effectués avec Marion Harmand : nous avons cherché des recettes de fabrications et préparer nos échantillons à l'IM-PMC pour pouvoir ensuite profiter des grandes installations internationales. J'ai donc pris le temps de travailler sur la partie simulation durant les périodes plus calmes, entre les différentes expériences.

Quelles sont les perspectives ?

Nos perspectives sont de terminer l'année avec une première analyse des résultats obtenus et d'en ressortir une ligne directrice qui mènera à des résultats scientifiques concrets pour une publication future je l'espère.

Je compte aussi bien avancer sur la partie simulation de spectre d'absorption afin d'être prêt pour l'expérience d'absorption X sous choc laser, qui aura lieu à l'ESRF à Grenoble fin novembre 2022.



«Nous étudions l'apparition de glaces de spin pyrochlores titanates de terres rares.»

Octave Duros partage sa recherche entre l'*Institut de Minéralogie, de Physique des Matériaux et de Cosmochimie* et le *Laboratoire de Chimie Physique - Matière et Rayonnement*.



Comment as-tu entendu parler du projet ?

C'est par le programme Erasmus+ de master *MaMaSELF+* (*Master in Materials Science Exploring Large-scale Facilities*), auquel j'ai participé et que l'offre m'a été transmise. Je m'imaginai plutôt effectuer une thèse hors de France, mais le projet financé par l'institut correspondait parfaitement à ma formation et proposait une recherche fondamentale originale et peu explorée. Je venais de consacrer mon mémoire de Master à l'étude de la propagation d'ondes magnétiques (ondes de spin) dans des nanostructures hybrides ferromagnétiques et supraconductrices. Et mon programme de Master est consacré à l'étude des matériaux sur grands instruments (réacteurs à neutrons, synchrotrons, accélérateurs linéaires, etc.). Le sujet de thèse du projet iMAT consiste justement à comprendre des phénomènes magnétiques originaux (glaces de spins, liquides de spins) présents dans une série de matériaux appelés pyrochlores titanates de terres rares, grâce à la diffusion résonante inélastique des rayons X (RIXS), une méthode de spectroscopie disponible uniquement sur sources synchrotrons ! J'allais pouvoir développer de nouvelles compétences et explorer un nouveau champ de recherche tout en continuant d'étudier des sujets qui me passionnent depuis longtemps.

Je me passionne depuis longtemps.

Les projets de l'institut sont généralement portés par deux laboratoires. Est-ce le cas ?

Effectivement, ce travail de recherche est porté par Gheorghe Sorin Chiuzbăian du LCPMR et Amélie Juhin de l'IMPMC. Sorin est spécialiste de la méthode d'observation, la spectroscopie RIXS : il a développé un outil propice à l'étude des terres rares qui nous fournit des données indispensables à la compréhension des phénomènes qui nous intéressent. Cet outil est disponible au synchrotron SOLEIL de Saclay. Mais les spectres RIXS obtenus sont extrêmement complexes et seul un traitement théorique avancé nous permet de correctement les exploiter. Cette compétence indispensable pour dé-

crypter les résultats est apportée par Amélie Juhin : elle est spécialiste de calculs dans la théorie des multiplets en champs de ligands, la théorie que nous utilisons pour reproduire les spectres RIXS de nos systèmes pyrochlores.

Comment s'est passée ton arrivée dans les laboratoires ?

Je travaille principalement au LCPMR où mon intégration s'est très bien passée, d'autant que je suis arrivé en même temps que d'autres doctorant.e.s : nous partageons un même rythme, nos questions et nos connaissances, c'est très agréable humainement et riche scientifiquement. Je me déplace aussi à l'IMPMC très régulièrement pour discuter avec Amélie Juhin et d'autres collègues impliqués dans le projet. La proximité de mes deux laboratoires d'encadrement est vraiment agréable au quotidien.

Comment se sont déroulés les premiers mois ?

Les six premiers mois ont été consacrés à une grosse étude bibliographique ainsi qu'aux calculs et simulations dans le cas du pyrochlore titanate d'ytterbium, l'un des matériaux de notre série. Étant donné que Gheorghe S. Chiuzbăian avait précédemment récolté des données expérimentales des systèmes que l'on étudie, je pouvais déjà comparer mes simulations. Le but est de choisir et d'améliorer un modèle théorique, et si besoin de justifier nos besoins complémentaires en expériences : l'accès au synchrotron SOLEIL est compliqué. Il y a de nombreuses demandes et les périodes d'expériences (appelés « temps de faisceaux ») sont accordées avec parcimonie après une importante étude de nos projets d'expériences. Le dépôt de ces projets n'est possible qu'une seule fois tous les 6 mois.

Aujourd'hui, je poursuis mes calculs et nous sommes en cours de rédaction d'un premier article scientifique sur le traitement des données initiales, donc dans le cadre du cristal de pyrochlore titanate d'ytterbium. Dès qu'un temps de faisceau nous sera accordé, nous pourrons consolider nos données et étendre nos calculs aux autres matériaux de la série, puis communiquer nos progrès dans de nouvelles publications.

«Mon projet demande énormément de manipulation et un gros travail de simulation.»

Charlie Kersuzan partage sa recherche entre l'*Institut des NanoSciences de Paris* et le *Laboratoire de Physique et d'Etude des Matériaux*.

Comment as-tu pris connaissance du projet ?

Pendant ma préparation à l'agrégation, j'ai voulu chercher un projet de thèse, découvrir la recherche universitaire et me donner les moyens de choisir entre les deux carrières. J'ai alors contacté Alexandra Fragola du LPEM, encadrante de mon stage de M2. Deux équipes m'ont proposé leur sujet dont l'un était co-encadré par Agnès Maître, responsable de la prépa au concours. Connaissant l'importance de l'équipe dans un travail de thèse, j'ai sauté sur l'occasion de collaborer avec elle, d'autant que ce sujet m'intéressait particulièrement : la détection biologique par mode de galerie.

Pourquoi cet intérêt ?

Ce qui me plait, c'est que le sujet est fortement interdisciplinaire : il demande énormément de manipulations, tant en chimie qu'en physique et il nécessite également un gros travail de simulations théoriques. Nous voulons concevoir des cavités à mode de galerie à partir de rien, puis y insérer des nanocristaux de semi-conducteurs. A plus long terme et sûrement au-delà de ma thèse, on pourrait envisager la fabrication de microlasers pour la détection biologique de molécules, d'anticorps ou d'antigènes.

Comment s'est déroulée ta première année ?

J'ai commencé par faire mes premières synthèses de nanocristaux en chimie au LPEM, puis j'ai enchaîné sur la fabrication de mes premières microcavités à mode de galerie par lithographie à l'INSP. Mon objectif était de réaliser des micro-piliers à base de résine SU8, puis d'y insérer des nanocristaux de semi-conducteurs (CdSe/CdS). Après des premiers mois d'optimisation et de renforcement des méthodes d'insertion, j'ai obtenu les premiers spectres d'émission de ces microcavités fluorescentes. J'ai pu observer des modes de galerie : la lumière émise

par les nanocristaux est piégée par réflexion totale interne à l'intérieur du micropilier. On observe alors des interférences constructives pour certaines longueurs d'ondes, un peu comme dans une cavité Fabry-Pérot... comme dans un laser !



Comment est partagé ton temps de travail ?

Je partage mon temps entre l'INSP à Jussieu où je m'occupe de la fabrication des micropiliers, et le LPEM à l'EPSCI pour la synthèse des nanocristaux. Je n'ai pas vraiment de programme fixe et les deux labos sont proches : j'alterne plusieurs fois par semaine, en fonction de mes besoins. L'avancée de la thèse est très agréable et j'ai régulièrement de nouveaux résultats, je suis très content de mon avancement jusqu'à maintenant.

Quelles sont tes objectifs aujourd'hui ?

Nous avons atteint un premier objectif en observant ces premiers modes de galerie. Maintenant l'ambition est de les perfectionner en améliorant le facteur de qualité des cavités. A terme, le but est clairement de réussir à fabriquer des microlasers : en excitant les nanocristaux avec un laser pulsé, nous espérons réaliser une inversion de population des électrons pour obtenir une émission laser. Cela permettrait d'avoir une émission intense à une longueur d'onde précise.

