

JOURNÉES SCIENTIFIQUES



Program

Scientific Days of the Doctoral
School “Sciences Fondamentales”

10 & 11
AVRIL 2024
dès 9H00

Présentations et Posters
des sujets de thèses en cours


UNIVERSITÉ
Clermont
Auvergne

AMPHITHÉÂTRE RECHERCHE
PÔLE PHYSIQUE
CAMPUS DES CEZEAUX

+ clermont
auvergne
métropole

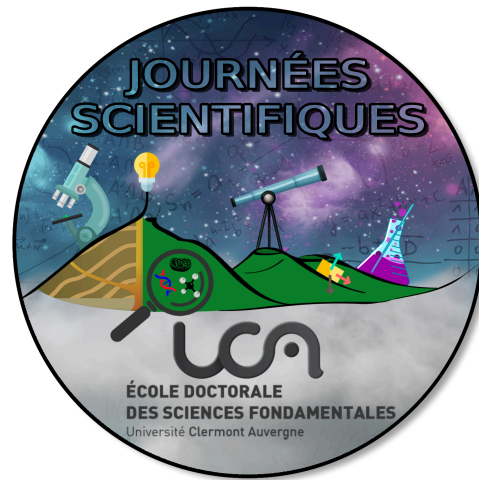
PROGRAMME COMPLET
sf.ed.uca.fr



Organization team:

- Marie Bretonniere (*ICCF*)
- Romain Jouanneaud (*IP*)
- Clément Bazantay (*LaMP*)
- Pauline Fombelle (*LaMP*)
- Nicolas Chadeau (*LPC*)
- Gaëtan Raymond (*LPC*)

Thanks to Maxime Pypec for the logo



With the contribution of :



Thursday, 11th of April 2024

- 9h00 - 9h20 **Lapatite, un minéral clef pour l'étude des continents via les systématiques isotopiques U-Th-Pb et Rb-Sr**
6.1. Julie MALLENS- LMV - page 16
- 9h25 - 9h45 **Toward the optimization of a Muon Collider Calorimeter**
6.2. Federico NARDI - LPC - page 17
- 9h50 - 10h10 **Analyse de la pollution fluviale en microplastiques par l'étude d'archives sédimentaires**
6.3. Jean-Sébastien BARBIER - ICCF - page 18
- 10h15 - 10h45 **Posters session 3:**
7.1. Martin AZON (LMBP - page 39) 7.4. Louise DAUGA (ICCF - page 42)
7.2. Romain SALIGNAT (LaMP - page 40) 7.5. Emmie BONILAUDI (LMV- page 43)
7.3. Cassandra GUERINOT (ICCF - page 41) 7.6. Abderraouf ROUAG (ICCF - page 44)
- 10h50 - 11h20 **Coffee break**
- 11h25 - 11h45 **Assessing and understanding the multiphasic atmospheric organic chemistry**
8.1 Etienne BRUGÈRE - LaMP - page 19
- 11h50 - 12h10 **Recent advances on the top-down approach for modeling block copolymers**
8.2. Mateus GARCIA RODOLFO - ICCF - page 20
- 12h15 - 12h35 **Commutativité et non commutativité en mathématiques, vers la notion d'algèbre de Hopf**
8.3. Julian LE CLAINCHE - LMBP - page 21
- 12h40 - 14h00 **Lunch break**
- 14h00 - 14h45 **Animation**
- 14h50 - 15h10 **Elaboration and characterization of cesium manganese bromide - Cs₃MnBr₅ - Influence of zinc alloying**
9.1. Pierre MARTIN - ICCF - page 22
- 15h15 - 15h35 **Contrôlabilité de l'équation de Sine-Gordon**
9.2. Sue CLARET - LMBP - page 23
- 15h40 - 16h00 **Synthesis and valorization of α -hydroxyketones through bio and organocatalysis**
9.3. Camille GADONA - ICCF - page 24
- 16h05 - 16h30 **Posters session 4:**
10.1 Steve KITOGA (LMV - page 45) 10.4. Romain GUILLARD (LMV - page 48)
10.2. Mathias GOUTTE (ICCF - page 46) 10.5. Silvia BERTOLOTTI (ICCF - page 49)
10.3. Lucas AINE (ICCF - page 47)
- 16h30 - 17h00 **Coffee break**
- 17h10 - 18h00 **Awards**
- 20h00 **A Drink in The Still Irish Bar**
7 Bd Léon Malfreyt, 63000 Clermont-Ferrand

Wednesday, 10th of April 2024
Day 1 - Talks

Ice crystals formation processes in convective clouds

Pierre GRZEGORCZYK

Wolfram Wobrock¹, Laurence Niquet¹, Frédéric Tridon^{1,2}, Céline Planche^{1,3}

Laboratoire de Météorologie Physique

Significant unknowns exist in our current understanding of the processes forming ice crystals in clouds, which are reflected by uncertainties in weather forecasts and climate projections. Ice crystals can form in clouds at temperatures below -3°C through different processes. One process, called heterogeneous nucleation, involves the presence of aerosol particles (desert dust, sea salts or even biological particles such as bacteria) suspended in the atmosphere, acting as ice-nuclei and initiating the formation of ice crystals.

However, in models, the nucleation process from aerosol particles does not create enough crystals below -30°C compared to the observed ice concentrations within clouds. Various supplementary ice multiplication mechanisms, including drop-crystal and crystal-crystal collisions, have been recognized as potential explanations for this disparity. However, our comprehension of these processes is still limited, and their influence remains poorly quantified.

Recently, three of these ice multiplication mechanisms were incorporated into the DESCAM microphysics model, which was developed at the Laboratoire de Météorologie Physique. To assess the influence of these novel mechanisms in the DESCAM model, numerous three-dimensional simulations of a convective cloud (i.e., a tropical thunderstorm) in the Cayenne region of French Guiana were conducted. These simulations were compared to data collected via airborne microphysics probes from the HAIC/HIWC (High Ice Water Content) campaign where ice crystal concentrations were sampled at different altitude levels. The results show that the fragmentation of crystals during their collisions is a key process to explain the large concentrations of crystals observed. In addition, a strong impact of the ice multiplication mechanisms of crystals on the overall development of the cloud was observed and quantified.

¹ *Université Clermont-Auvergne, Laboratoire de Météorologie Physique, INSU-CNRS UMR 6016, Clermont-Ferrand, France*

² *DIATI, Politecnico di Torino, Turin, Italy*

³ *Institut Universitaire de France*

Highly Luminescent Rare-Earth-Free Phosphor Constituted of SRB Molecules Intercalated Into Layered Double Hydroxide

Guillaume ZERBIB

Damien BOYER¹, Geneviève CHADEYRON¹ and Fabrice LEROUX¹

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand

Light-emitting diodes (LEDs) involve UV or blue chip associated with a phosphor to produce a white or coloured light. The employed phosphors are generally formulated with controversial rare-earth (RE) elements because of environmental and geopolitical issues. [1] Thus, RE-free phosphors should be developed. In the aim to design a red-emitting phosphor, we focused on Sulforhodamine B (SRB), an organic fluorophore exhibiting a strong red-orange luminescence under UV/blue excitation when diluted in aqueous solution. However, its strong luminescence is quenched by aggregation in solid state. But when the SRB molecules are co-intercalated in a LDH host structure with molecules so-called spacers allowing their dispersion, it gives rise to an intense luminescence of the solid hybrid material comparable to that is observed for SRB in dilute solution. Various molecules as spacers were used to adjust at the best the basal spacing needed for the efficient intercalation of SRB within the LDH according to the Size Matching Interlayer Space (SMIS) method. [2],[3] Their role is also to provide an organophilic environment at the vicinity of the LDH layers external surfaces to be subsequently well dispersed into polymer films such as silicone or LDPE. Such optimized combination leads to interesting optical performances such as photoluminescence quantum yield reaching up to 60% and to a high thermal stability for the powders and the films, making this new hybrid material a suitable phosphor for optical devices.

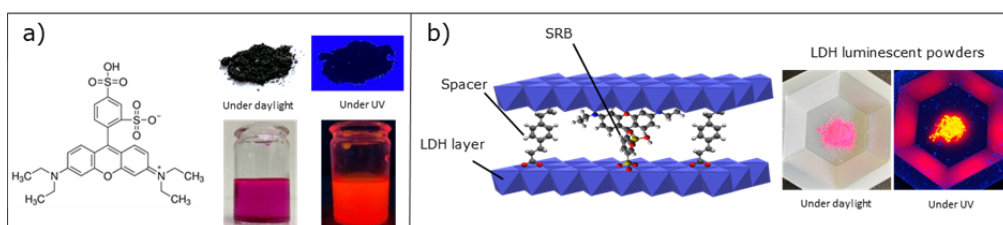


Figure 1 a) Structure of SRB and its luminescence, b) LDH-Spacer-SRB structure and its luminescence.

¹ Université Clermont Auvergne, Clermont Auvergne INP, CNRS, ICCF, Clermont-Ferrand, FRANCE

REFERENCES:

- [1] Balaram, V, Geoscience Frontiers. 2019, 10, 1285-1303.
- [2] Valleix, R; Zhang, Q; Boyer, D; Boutinaud, P; Chadeyron, G; Feng, Y; Okuno, H; Réveret, F; Hintze-Bruening, H; Leroux, F, Adv. Mater. 2021, 33.
- [3] Zerbib, G; Boyer, D; Chadeyron, G; Réveret, F; Leroux, F, ACS Appl. Opt. Mater. 2023, 1, 9, 1535-1545.

Simuler efficacement des systèmes de particules

Tristan GUYON

Arnaud Guillin¹, Manon Michel¹

Laboratoire de Mathématiques Blaise Pascal

Mon travail porte sur la conception d'algorithmes ayant pour but de simuler des systèmes de physique. Les systèmes considérés sont issus de la physique statistique et mettent en interaction un grand nombre de particules. Le but des méthodes mises en place est d'accélérer la convergence des algorithmes vers les configurations pertinentes sur le plan physique.

Une partie significative de l'échantillonnage des systèmes de la physique statistique passe par l'utilisation de méthodes Monte Carlo par chaînes de Markov, où l'évolution se fait typiquement étape par étape par des changements locaux et aléatoires. Le cadre utilisé ici est le cadre des processus de Markov non-réversibles, qui introduisent une persistance dans les mouvements choisis pour explorer l'espace des configurations : une unique particule est déplacée dans une même direction jusqu'à collision, après quoi elle s'arrête et sa partenaire continue le mouvement.

Un premier volet de ce projet porte sur la conception théorique d'algorithmes nouveaux à l'aide de méthodes mathématiques, avec l'introduction de mouvements de rotation non-réversibles sur les systèmes de sphères dures et de dimères durs. Un deuxième volet porte sur la réalisation d'un code parallélisé pour du calcul haute performance, afin de sonder ces systèmes avec un grand nombre de particules et établir les propriétés de passage à l'échelle de nos algorithmes.

¹Laboratoire de Mathématiques Blaise Pascal, UCA

L'utilisation de l'azote inorganique par les bactéries dans le système atmosphérique

Frédéric MATHONAT

Pierre Amato¹ et Barbara Ervens¹

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand

L'implication des microorganismes dans les cycles biogéochimiques de certains écosystèmes comme l'atmosphère est encore peu étudiée. L'atmosphère, milieu de vie ou simple transport, héberge des microorganismes avec un métabolisme actif (Klein et al., 2016 ; Amato et al., 2017). Ces derniers sont donc capables d'ingérer, d'incorporer, de modifier et d'émettre, des composés présents dans l'atmosphère. Ceci a notamment été démontré au niveau de composés carbonés (Ervens et Amato., 2020). L'un des autres éléments essentiels à la biosphère et présent en quantité dans l'atmosphère est l'azote sous ses différentes formes inorganiques, en particulier, avec par exemple le diazote (N₂) qui représente 78% de la composition de l'air mais aussi l'ammonium (NH₄⁺) (2,19 – 531,13 µM), nitrate (NO₃⁻) (0,8 – 516,15 µM), l'ammoniaque (NH₃), nitrite (NO₂⁻) et les oxydes d'azote (NO_x), qui peuvent aussi bien se retrouver dans la phase gaz que dans la phase aqueuse de l'atmosphère (nuage) (Renard et al., 2020) avec comme origine des activités anthropiques ou naturelles. Mes recherches portent sur l'utilisation de ces formes d'azotes d'inorganiques par les microorganismes en utilisant des méthodes de biologie moléculaire (qPCR), -omiques (métagénomique, transcriptomique), et de culture microbienne (biodégradation) pour finalement, estimer par modélisation l'implication des bactéries dans le cycle biogéochimique de l'azote atmosphérique inorganique.

¹ Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND

REFERENCES:

- Klein, A. M., Bohannan, B. J. M., Jaffe, D. A., Levin, D. A., & Green, J. L. (2016). Molecular Evidence for Metabolically Active Bacteria in the Atmosphere. *Frontiers in Microbiology*, 7. <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fmicb.2016.00772>
- Amato, P., Joly, M., Besaury, L., Oudart, A., Taib, N., Moné, A. I., Deguillaume, L., Delort, A.-M., & Debroas, D. (2017). Active microorganisms thrive among extremely diverse communities in cloud water. *PLOS ONE*, 12(8), e0182869. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0182869>
- Ervens, B. and Amato, P. (2020). The global impact of bacterial processes on carbon mass. *Atmos. Chem. Phys.*, 20, 1777–1794, <https://doi.org/10.5194/acp-20-1777-2020>.
- Renard, P., Bianco, A., Baray, J.-L., Bridoux, M., Delort, A.-M., & Deguillaume, L. (2020). Classification of Clouds Sampled at the Puy de Dôme Station (France) Based on Chemical Measurements and Air Mass History Matrices. *Atmosphere*, 11(7), Art. 7. <https://doi.org/10.3390/atmos11070732>

Feasibility study of a rare heavy flavoured decay at FCC-ee

Tristan MIRALLES

Stéphane Monteil¹, Eric Cogneras¹

Laboratoire de Physique de Clermont

The Standard Model is the reference theory to describe nature at the scale of the elementary components of matter, through the prism of three of the four fundamental interactions: electromagnetism, strong nuclear interaction, and weak nuclear interaction. The goal of Particle Physics is, through experiments measuring processes at the shortest accessible distances (10^{-20} m), to test the validity of the Standard Model. Up to date, particle physicists, by conducting measurements at 10^{-4} precision, have not been able to disprove the Standard Model. However, the Standard Model has shortcomings; among them is its failure to explain the magnitude of the matter-antimatter asymmetry in the universe.

Tests of the Standard Model have led to the creation of the Large Hadron Collider (LHC), the largest scientific experiment of human history, where the origin of elementary particle mass was experimentally demonstrated by the discovery of a particle compatible with the Brout-Englert-Higgs boson in 2012.

In this presentation, the current landscape of experimental particle physics will be briefly described, and then one possible vision of its future will be explored through the Future Circular Collider (FCC) project in its electron-positron collision phase (FCC-ee) [1]. FCC-ee would allow to probe the Standard Model with a precision higher than the LHC, thanks to the exquisite luminosity at the four electroweak thresholds and a cleaner experimental environment than the hadronic environment of the LHC.

Specifically, FCC-ee's ability to measure the probability of occurrence (branching fraction) of a very rare and particularly complex decay mode $B^0 \rightarrow K^{*0} \tau^+ \tau^-$, unreachable to the LHC, will be explored. This decay mode involves a $b \rightarrow s \tau^+ \tau^-$ quark-level transition, and its measurement could be instrumental to test the validity of possible Beyond the Standard Model theories addressing the shortcomings of the Standard Model. Studying the feasibility of the measurement of this mode at FCC-ee will help to design the FCC-ee detector that meets the necessary requirements for this measurement.

¹Laboratoire de Physique de Clermont (LPC)

REFERENCES:

[1] Future Circular Collider Study. Volume 3: The Hadron Collider (FCC-hh) Conceptual Design Report, preprint edited by M. Benedikt et al. CERN accelerator reports, CERN-ACC-2018-0058, Geneva, December 2018. Published in Eur. Phys. J. ST.

Design of reversible networks for sustainable resins via multi-scale molecular dynamics

Sebastien LAGET

Patrice Malfreyt, Alain Dequidt, Sebastien Garruchet, Marie-Noëlle Poradowski

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand

Thermosetting polymers are known for their toughness, resistance, and durability. However, they are extremely hard to reprocess and recycle. Used in great variety of materials used under harsh conditions, they play a key role in the polymer industry.

Last decade, a new branch of thermosetting polymers has been discovered, allowing the material to gain some fluidity at a specific temperature, and as such allowing it to be reprocessed. Named vitrimers, these new materials can open the door to a cleaner and greener polymer industry, avoiding the burying of used thermosetting polymers as it is currently the norm.

Molecular dynamics, or atomistic simulations, adds another step toward this goal by reducing the chemical wastes and helping gain a better understanding of the material behavior at an atomistic level. The versatility of molecular dynamics can also help a user with little knowledge over a specific material to access a large panel of properties, creating a useful and powerful tool for preliminary studies.

Compositions et conditions de formation des magmas primaires des volcans récents du Cézallier, Massif Central, France

Laurine BARREAU

Didier Laporte¹, Nicolas Cluzel¹

Laboratoire Magmas et Volcans

Le Massif Central est le siège d'une activité volcanique plus ou moins intense depuis 65 Ma. C'est entre 15 Ma et l'actuel que se concentre la majeure partie de l'activité avec les manifestations les plus récentes localisées dans les provinces du Bas-Vivarais et de la Chaîne des Puys. La dernière éruption connue a eu lieu au Lac Pavin il y a seulement 6700 ans. Ces provinces sont considérées comme encore actives et de ce fait, il est important de connaître l'origine du volcanisme du Massif Central qui est encore mal comprise. La province volcanique du Cézallier a eu une période d'activité ancienne (8-3 Ma) et une autre plus récente, datée autour de 250 000 ans, dont les produits éruptifs sont encore bien conservés. Ces magmas sont remontés rapidement depuis les profondeurs du manteau et contiennent de petites quantités de cristaux (≈ 30 % vol ; olivine, clinopyroxène). Au cours de leur croissance, ces cristaux ont piégé de petites gouttelettes de magma que l'on appelle des inclusions magmatiques. Ces objets de quelques dizaines à centaines de μm^3 permettent notamment d'obtenir la composition et les teneurs en éléments volatils (H_2O , CO_2) des liquides. En mesurant les concentrations en éléments volatils dissous dans le magma au moment du piégeage de l'inclusion, on peut remonter aux conditions de piégeage (pression, température), et dans les cas les plus favorables, aux conditions de fusion du manteau.

Les résultats préliminaires de l'étude des laves du Cézallier montrent que les liquides piégés dans les inclusions sont très riches en CO_2 (jusqu'à 1.8 % pds dissous dans le verre) et peuvent contenir jusqu'à 3.2 % pds d'eau. En plus du verre magmatique, les inclusions du Cézallier contiennent systématiquement une ou plusieurs bulles qui sont remplies de CO_2 sous forme fluide (gazeux ou mélange gaz-liquide) et dont les parois sont tapissées de nanocristaux de carbonates (calcite magnésienne, magnésite, etc.). Afin de remonter à la teneur totale en CO_2 du magma au moment du piégeage de l'inclusion en profondeur, il est donc nécessaire de prendre en compte le CO_2 contenu dans la bulle sous forme fluide ou solide, en plus du CO_2 dissous dans le verre. Pour estimer la teneur initiale en CO_2 des magmas de la province du Cézallier, nous prévoyons de réaliser des expériences d'homogénéisation à haute pression et haute température des inclusions magmatiques. Ces expériences ont pour objectif de dissoudre tout le CO_2 de la bulle dans le magma afin de produire un verre homogène dont la teneur en CO_2 pourra être mesurée par spectrométrie Raman. Un autre élément d'intérêt dans les produits du Cézallier est le soufre. En effet, les inclusions magmatiques contiennent jusqu'à 3500 ppm de S et on observe des globules de sulfure piégés au sein des différents minéraux constitutifs de la roche.

Toutes ces informations vont nous permettre de caractériser la composition des liquides issus de la fusion du manteau sous la province du Cézallier et de nous donner des indications sur la composition de la source ainsi que sur les conditions de fusion à l'origine des laves en surface.

¹ Université Clermont Auvergne, CNRS, IRD, Laboratoire Magmas et Volcans, OPGC, 6 avenue Blaise Pascal, 63178 Aubière, France

Des algorithmes pour inférer les conditions initiales de l'Univers

Vincent SOUVETON

Arnaud Guillin¹, Manon Michel¹, Guilhem Lavaux²

Laboratoire de Mathématiques Blaise Pascal

Comprendre la structure à très grande échelle de l'Univers est une question majeure en cosmologie. Développée par le consortium Aquila, la machinerie BORG [1,2] repose sur des algorithmes d'échantillonnage de type Markov Chain Monte Carlo pour reconstruire les conditions de l'Univers âgé de quelques centaines de milliers d'années à partir de données issues d'observations astronomiques. Les conditions initiales étant liées aux conditions actuelles par un processus déterministe, on peut alors obtenir une caractérisation probabiliste de notre Univers à partir de la distribution probabiliste de ses fluctuations originelles. Le but de cet exposé sera de donner une idée des grands principes qui président au fonctionnement de BORG, d'en présenter quelques résultats et d'expliquer les prochains défis que nous essayons de relever.

¹ *Laboratoire de Mathématiques Blaise Pascal, UCA, CNRS*

² *Institut d'Astrophysique de Paris, Sorbonne Université, CNRS*

REFERENCES:

[1] Jens Jasche, Benjamin D. Wandelt, Bayesian physical reconstruction of initial conditions from large-scale structure surveys, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Volume 432, Issue 2, 21 June 2013, Pages 894–913, <https://doi.org/10.1093/mnras/>

[2] J. Jasche, G. Lavaux, Physical Bayesian modelling of the non-linear matter distribution: New insights into the nearby universe, *A&A* 625 A64 (2019), DOI: 10.1051/0004-6361/201833710

Thursday, 11th of April 2024
Day 2 - Talks

L'apatite, un minéral clef pour l'étude des continents via les systématiques isotopiques U-Th-Pb et Rb-Sr

Julie MALLENS

Martin Guitreau¹, Régis Doucelance¹

Laboratoire Magmas et Volcans

La Terre est constituée de grands réservoirs de compositions chimiques distinctes. Parmi ceux-ci, la croûte continentale est majoritairement constituée de roches magmatiques : les granites. Ces derniers ont enregistré l'évolution de la Terre depuis environ 4,4 milliards d'années (Ga), soit la quasi-totalité de l'histoire de notre planète. Néanmoins, un flou subsiste quant aux modalités de formation et d'évolution des roches continentales formées il y a plus de 2,5 Ga durant l'éon Archéen. L'objectif de ce travail de thèse est donc d'apporter des contraintes sur la formation et l'évolution des continents, au début de l'histoire de la Terre.

L'apatite, de formule chimique $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{Cl},\text{F},\text{OH})$, est un minéral phosphaté clef pour l'étude de la formation des continents car il cristallise dans toutes les roches de la croûte continentale. De plus, il a la capacité d'enregistrer la très grande majorité des processus que les roches crustales ont subi. Ces processus s'étendent de la formation de la croûte par fusion partielle puis cristallisation, aux nombreux événements géologiques qui affectent les roches continentales après leur mise en place (*i.e.*, déformations et recristallisations associés au métamorphisme, circulations de fluides, tectonique)¹.

Afin d'extraire les informations piégées dans l'apatite, nous avons mis au point une nouvelle approche basée sur les systèmes isotopiques U-Th-Pb (uranium, thorium, plomb) et Rb-Sr (rubidium, strontium). Ces isotopes sont mesurés à très haute résolution spatiale (~30 μm) dans l'apatite à l'aide de spectrométrie de masse à source plasma couplée à un système d'ablation laser. La systématique radioactive U-Th-Pb permet de dater les événements géologiques enregistrés par l'apatite. Ensuite, les isotopes du rubidium et du strontium tracent l'origine des magmas impliqués dans la formation des apatites, et donc des granites de la croûte continentale. Ces outils isotopiques sont appliqués à une localité cible : le craton archéen du Dharwar Ouest (Inde). Ce dernier comprend des roches formées entre 3,45 et 2,50 Ga, et offre ainsi une fenêtre temporelle parfaitement adéquate pour étudier l'évolution précoce des continents.

¹ *Laboratoire Magmas et Volcans, CNRS-UMR6524, IRD-UMR163, OPGC, Université Clermont Auvergne, F- 63178 Aubière, France*

REFERENCES:

[1] Bruand *et al.*, (2020). *Geochemical Perspectives*. 13, 7-1

Towards the optimization of a Muon Collider Calorimeter

Federico NARDI

J. Donini¹, T. Dorigo², J. Kieseler²

Laboratoire de Physique de Clermont
University of Padova

Setup design plays a pivotal role in experiment development, particularly in high-energy physics, where vast temporal and spatial scales dictate the course of research for decades. Our research, embedded in the MODE Collaboration[1], aims to generalize Machine Learning tools for creating a differentiable pipeline capable of suggesting optimal configurations for the Muon Collider[2] Electromagnetic Calorimeter geometry.

This presentation outlines the structure of our pipeline, emphasizing the methods employed to ensure full code differentiability. Our primary focus lies in maximizing the reconstruction efficiency of photons amidst Beam-Induced background from muon decays. The approach relies on three core blocks:

(I) Signal Event Generator: Responsible for generating signal events.

(II) Background Generator: Focused on simulating background events.

(III) Reconstruction Algorithm: Adapting the DeepJetCore Object Condensation framework[3].

The talk includes a showcase of performance tests for each core block, shedding light on their efficacy. Additionally, we provide insights into the current status and challenges encountered in implementing the complete pipeline.

¹ *Laboratoire de Physique de Clermont*

² *INFN, Sezione di Padova*

² *KIT, Karlsruhe*

REFERENCES:

[1] T. Dorigo et al., *Toward the end-to end optimization fo particle physics instruments with differentiable programming*, *Reviews in Physics* **10**, 100085 (2023)

[2] K.L. Long et al., *Muon colliders to expand the frontiers of Particle Physics*, *Nature Physics* **17**, 289-292 (2021)

[3] J. Kieseler, *Object condensation: one-stage grid-free multi-object reconstruction in physics detectors, graph and image data*, *Eur. Phys. J. C* **80**, 886 (2020)

Analyse de la pollution fluviale en microplastiques par l'étude d'archives sédimentaires

Jean-Sébastien BARBIER

Florence Delor-Jestin¹, Sophie Ayrault², Jean-Michel Andanson¹

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand
Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement

Il est aujourd'hui démontré que les microplastiques (MP) sont présents de manière ubiquitaire dans notre environnement. Ils ont été caractérisés dans diverses matrices : les eaux¹ (mer, rivière, karstique, eaux usées, eau potable), les sédiments², l'air³, le biote⁴. Cette thèse porte sur la reconstruction spatiale et temporelle des contaminations en MP du bassin de la Seine, en amont et en aval de Paris, depuis les années 1950 jusqu'à aujourd'hui. Ce travail fait partie du projet Sedi-PLAST (MP dans les sédiments continentaux et les archives sédimentaires) qui associe 7 laboratoires partenaires et est financé par l'ANR. La méthodologie mise en œuvre débute par une approche sédimentologique, réalisée au LSCE (Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement). Elle inclut l'acquisition et la caractérisation de carottes sédimentaires pertinentes pour l'enregistrement des MP transitant dans la Seine (datation, granulométrie, propriétés des sédiments). Le contenu MP a ensuite été extrait de la matrice sédimentaire puis caractérisé à l'ICCF, grâce à une analyse par infrarouge. Un imageur micro-IRTF équipé d'un Focal Plane Array (FPA), permet l'acquisition simultanée de plusieurs milliers de spectres avec une résolution spatiale fixée à une vingtaine de microns. Cette technique permet de superposer l'image optique et l'image chimique des échantillons, puis d'identifier la taille et la composition polymérique des MP.

Les résultats de cette historique démontrent une hausse des concentrations en MP des années 1950 aux années 1990, avec une évolution des polymères suivant l'historique des utilisations. Les premières données des années 1990 à aujourd'hui montrent une décroissance à l'amont et à l'aval. Cela suggère un effet filtre des technologies de traitement de l'eau mises en place ces dernières décennies, qui serait efficace sur la pollution MP à l'échelle du bassin.

¹ Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF

² Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement (LSCE), CEA-CNRS-UVSQ

REFERENCES:

- [1] Ivar do Sul, J. A. & Costa, M. F. The present and future of microplastic pollution in the marine environment. *Environmental Pollution* **185**, 352–364 (2014).
- [2] Su, L. *et al.* Microplastics in Taihu Lake, China. *Environmental Pollution* **216**, 711–719 (2016).
- [3] Dris, R., Gasperi, J., Saad, M., Mirande, C. & Tassin, B. Synthetic fibers in atmospheric fallout: A source of microplastics in the environment? *Marine Pollution Bulletin* **104**, 290–293 (2016).
- [4] Rochman, C. M., Kurobe, T., Flores, I. & Teh, S. J. Early warning signs of endocrine disruption in adult fish from the ingestion of polyethylene with and without sorbed chemical pollutants from the marine environment. *Science of The Total Environment* **493**, 656–661 (2014).

Assessing and understanding the multiphasic atmospheric organic chemistry

Etienne BRUGÈRE

E. Freney¹, A. Colomb¹, T. Latchimy², M. Ribeiro¹, J. Wu¹, A. Borbon¹

Laboratoire de Météorologie Physique

Atmospheric organic aerosols (OA) are important because of their ubiquity and significance. They are the key drivers of air quality and climate change. While the secondary fraction of OA, namely SOA, is dominant in mass (between 50 to 85%), our capability to predict SOA is still uncertain because of the influence of multiple parameters (ie. humidity, temperature, NO_x, nature and vapor pressure of organic gaseous precursors). Quantifying the partitioning between the gas and particle phases of semi-volatile organic compounds (SVOCs) in real conditions is one relevant approach to better constraint the budget of SOA and to develop accurate parametrization for organic aerosol formation in climate models.

MOCCA (Mass spectrOmetry for the multiphasic Composition of the Cloudy Atmosphere) is a novel mass spectrometry platform designed to characterize organic compositions in the gas, particle, and cloud water phases. MOCCA integrates a high-resolution PTR-ToF-MS (model 6000X2 IONICON Analytik GmbH, Austria), a CHARON (CHemical Analysis of aeRosol ON-line) inlet, and a temperature-controlled auto sampler (Combipal) to delve into the molecular-level composition of organic matter.

The aim of my PhD is to optimize MOCCA to deploy it over diverse environments, a temperate suburban area (suburban Paris, SIRTAF, France, ACROSS project), a subtropical forest site (São Paulo, Brazil, RMG, BIOMASP+ project), and a background site at the CO-PDD NF (France) platform in the cloudy atmosphere (Cézeaux-Aulnat-Opme-puy de Dôme at 1465m a.s.l.).

In this talk some performances of MOCCA in those contrasting environments will be shown. Then multiphasic partitioning of gases and particles will be highlighted regarding the different atmospheric conditions.

¹ *Laboratoire de Météorologie Physique, UMR 6016, Aubière, 63178, France*

² *Observatoire de Physique du Globe de Clermont-Ferrand, UAR 833, Aubière, 63178, France*

REFERENCES:

[1] B. Nozière, M. Kalberer, M. Claeys, J. Allan, B. D'Anna, S. Decesari, E. Finessi, M. Glasius, I. Grgic, J. F. Hamilton, T. Hoffmann, Y. Iinuma, M. Jaoui, A. Kahnt, C. J. Kampf, I. Kourtchev, W. Maenhaut, N. Marsden, S. Saarikoski, J. Schnelle-Kreis, J. D. Surratt, S. Szidat, R. Szmigielski and A. Wisthaler. The molecular identification of organic compounds in the atmosphere: state of the art and challenges. *Chemical reviews*, 115:3919–3983, 5 2015.



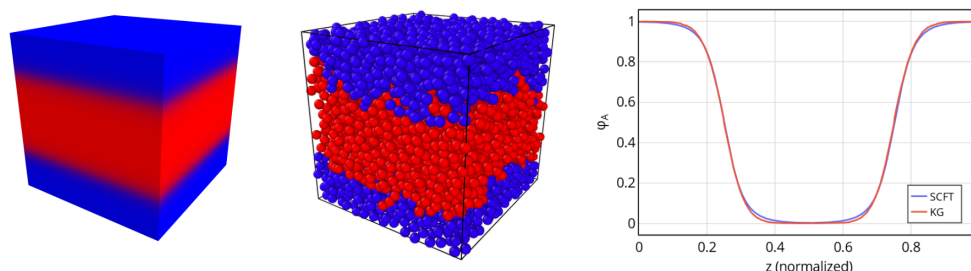
RECENT ADVANCES ON A TOP-DOWN APPROACH FOR MODELING BLOCK COPOLYMERS

Mateus GARCIA RODOLFO

Alain DEQUIDT¹, Florent GOUJON¹, Joel TCHOUFAG^{1,2}

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand

Containing soft (low-T_g) and hard (high-T_g) monomer species on the same polymer molecule, block copolymer systems can achieve thermoplastic and elastomeric properties not by primary bond cross-linking between chains, but by micro-phase separation mechanisms and formation of a 3D network of rigid domains bridged by the soft blocks.^[1] A top-down, coarse-grained approach to study such systems via modeling and simulation is presented. Self-consistent field theory (SCFT) is used to study the phase behavior of a block copolymer, which determines its most stable phase and its density field in the conditions of interest.^[2] This density field is then used as a bias to generate the first configuration of a coarse-grained (CG) particle model of the block copolymer^[3], which then undergoes a relaxation routine via Dissipative Particles Dynamics. We present recent advances on a method to parametrize the CG model, done by matching its density field after relaxation to that predicted by SCFT, and the challenges involved in implementing it to real block copolymer systems.



Left: the density field of the lamellar phase of a diblock copolymer calculated via self-consistent field theory (SCFT). Middle: the coarse-grained model of the same diblock copolymer. Right: density field predicted by SCFT, plotted against that of the CG model.

¹ SimatLab, Université Clermont Auvergne, CNRS, ICCF, Aubière, France

² Manufacture Française des Pneumatiques Michelin, Clermont-Ferrand, France

REFERENCES:

- [1] Spontak, R. J.; Patel, N. P, COCIS 2000, 5 (5–6), 333–340.
- [2] Arora, A. et al Macromolecules 2016, 49 (13), 4675–4690.
- [3] Aoyagi, T. et al, CPC 2002, 145 (2), 267–279.

Commutativité et non commutativité en mathématiques, vers la notion d'algèbre de Hopf

Julian LE CLAINCHE

Julien Bichon¹

Laboratoire de Mathématiques Blaise Pascal

Les algèbres de Hopf sont des objets mathématiques généraux permettant d'unifier diverses théories mathématiques (groupes discrets, algèbres de Lie, ...).

Pour introduire ces objets, on commencera par parler de la commutativité en mathématiques. On dit qu'une opération est commutative si le sens dans lequel elle est effectuée est ne modifie pas le résultat obtenu (ex : $3 + 4 = 4 + 3$). Les opérations de base sur les nombres réels (somme, produit) sont commutatives mais il est très naturel de s'intéresser à des opérations non-commutatives (produit de matrices).

On introduira ensuite la notion importante de diagramme commutatif qui permet de représenter graphiquement la commutativité et enfin, on définira les algèbres de Hopf en motivant leur utilisation en mathématiques.

¹ *Laboratoire de Mathématiques Blaise Pascal*

Elaboration and characterization of cesium manganese bromide - Cs₃MnBr₅ – Influence of zinc alloying

Pierre MARTIN

Audrey POTDEVIN¹, Geneviève CHADEYRON¹, François REVERET¹ and Damien BOYER¹

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand

Inorganic lead halide perovskites, with a general formula CsPbX₃ (X=Cl⁻, Br⁻, I⁻) have triggered a huge scientific interest, particularly since 2015. Despite exhibiting excellent quantum yields and a narrow, tunable emission band, their poor stability against oxygen, moisture, thermal and photonic stresses need to be considered. Moreover, lead toxicity is another drawback restricting their applications. Consequently, the development of stable and Pb-free materials is attracting a strong interest [1]. In this context, manganese (II) halides represent a promising class of compounds. Cs₃MnBr₅, where Mn²⁺ ions are located in a tetrahedral field, giving rise to green emission under blue or UV excitations has been particularly studied. However, it is established that its optical properties are greatly affected when exposed to air [2-3]. In a previous work, we showed that this was attributed to a hydration phenomenon, and that it was possible to limit it through zinc alloying, producing Cs₃Zn_{1-x}Mn_xBr₅ [3].

In the present talk, the influence of zinc amount on the structural, morphological and optical properties of Cs₃MnBr₅ is studied. The solid solutions have been synthesized through an antisolvent precipitation developed in reference [3]. Results show that for high zinc concentration, an increase in internal quantum yield (iQY) with respect to pure Cs₃MnBr₅ is achieved. This observation has been correlated with a zinc-mediated limitation of a thermal ionization process, and this hypothesis has been corroborated by luminescence decay curves analysis.

¹ Université Clermont Auvergne, Clermont Auvergne INP, CNRS, Institut de Chimie de Clermont-Ferrand, Clermont-Ferrand, France

REFERENCES:

- [1] A. Dey *et al.*, « State of the Art and Prospects for Halide Perovskite Nanocrystals », *ACS Nano*, vol. 15, n° 7, p. 10775-10981, 2021, doi: 10.1021/acsnano.0c08903.
- [2] W. Chen *et al.*, « Environmental-Friendly Cs₃Mn_xZn_{1-x}Br₅@PS Films Used for Wide Color Gamut Backlight Displays », *ACS Sustain. Chem. Eng.*, vol. 10, n° 16, p. 5333-5340, 2022, doi: 10.1021/acssuschemeng.2c00675.
- [3] P. Martin, A. Potdevin, G. Chadeyron, F. Réveret, et D. Boyer, « New Antisolvent Precipitation Synthesis of Green-Emitting Lead-Free Zinc-Alloyed Perovskite-Inspired Manganese Halides Cs₃Mn_{1-x}Zn_xBr₅ », *ACS Appl. Opt. Mater.*, 2023, doi: 10.1021/acsaom.3c00377.

Acknowledgements:

This work was supported by the International Research Center "Innovation Transportation and Production Systems" of the I-SITE CAP 20-25.

Contrôlabilité de l'équation de Sine-Gordon

Sue CLARET

Arnaud Münch¹, Jérôme Lemoine¹

Laboratoire de Mathématiques Blaise Pascal

Modèle : On considère une chaîne de longueur L composée de N pendules couplés par des ressorts de torsions (voir Fig. 1). On note θ_n l'écart angulaire du n -ième pendule et a la distance entre deux pendules consécutifs. L'évolution d'un pendule est déterminée par les positions des pendules voisins les plus proches et sa position vérifie l'équation de mouvement suivante :

$$\partial_{tt}^2 \theta_n + \omega^2 \sin \theta_n = c^2 \frac{\theta_{n+1} - 2\theta_n + \theta_{n-1}}{a^2}, \quad n \in \{1, \dots, N-2\}$$

où c et ω sont des constantes dépendante des paramètres physique liés au modèle. Lorsque le nombre de pendules tend vers l'infini (i.e. lorsque a tend vers 0), $\theta_n(t) = \theta(na, t)$ devient une fonction continue de l'espace $\theta(x, t)$ vérifiant

$$\partial_{tt}^2 \theta - c^2 \partial_{xx}^2 \theta + \omega^2 \sin \theta = 0.$$

Problème : On suppose que l'on peut agir sur la chaîne de pendules couplés via une force $v = v(t)$ agissant à une extrémité. La fonction θ soumise à la force v vérifie le système d'évolution (*) $\{\partial_{tt}^2 \theta - c^2 \partial_{xx}^2 \theta + \omega^2 \sin \theta = 0 \quad Q_T = (0, L) \times (0, T) \quad \theta(0, t) = 0, \quad \theta(L, t) = v(t)$ où (u_0, u_1) modélise la position/vitesse initial des écarts angulaire de la chaîne de pendule. Le problème de contrôle est alors le suivant : pour (u_0, u_1) donnée, trouver quelle force $v(t)$ doit-on appliquer pour ramener la chaîne de pendules couplés à l'état d'équilibre en un temps T initialement fixé.

Etude du système (*) : Pour étudier la contrôlabilité de (*) qui est une équation des ondes non linéaire, appelé équation de Sine-Gordon, on va se ramener à une équation linéaire dont on a des résultats de contrôlabilité. En particulier, on va introduire un opérateur de point fixe Λ qui a toute fonction z d'un certain espace va associer une certaine solution contrôlée de l'équation des ondes linéarisé $\partial_{tt}^2 y - c^2 \partial_{xx}^2 y + \omega^2 \sin z = 0$. Ainsi, le problème de contrôlabilité associé à (*) est réduit à l'existence d'un point fixe pour l'opérateur Λ (y point fixe si $\Lambda(y) = y$). L'existence d'un tel point fixe sera vérifiée menant à la contrôlabilité de (*). L'opérateur Λ construit précédemment aura une propriété très particulière permettant de construire explicitement un contrôle pour (*). Des simulations numériques seront présenté pour illustrer le résultat

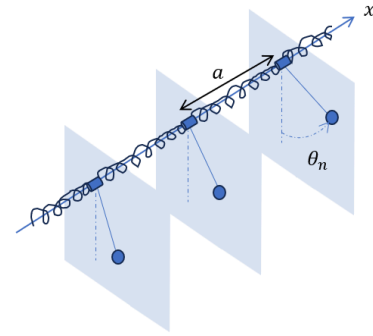


Fig. SEQ Figure 1* ARABIC 1 - Schéma d'une partie de la chaîne.

¹ Université Clermont-Auvergne – LMB

Synthesis and valorization of α -hydroxyketones through bio and organocatalysis

Camille GADONA

Laurence Hecquet¹, Franck Charmantray¹

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand

The aim of my PhD project concerns the enzymatic synthesis of highly valuable unsymmetrical α -hydroxyketones (acyloins), precursors of vinylene carbonate, useful building blocks for prodrugs synthesis such as medoxomil (Fig. 1). These acyloins were never investigated before due to the difficulty to control the regioselectivity by chemical ways and could extend the scope of vinylene carbonates. The strategy combining enzymes and organocatalyst in a one-pot could be performed sequentially or simultaneously avoiding the purification of intermediates and favoring mild reaction conditions in respect of the **green chemistry principles**. The enzymatic part of the strategy (ANR HYCAT) is developed at ICCF and the organocatalytic part at ICBMS (Institut de Chimie et de Biochimie Moléculaire et Supramoléculaire) in Lyon.

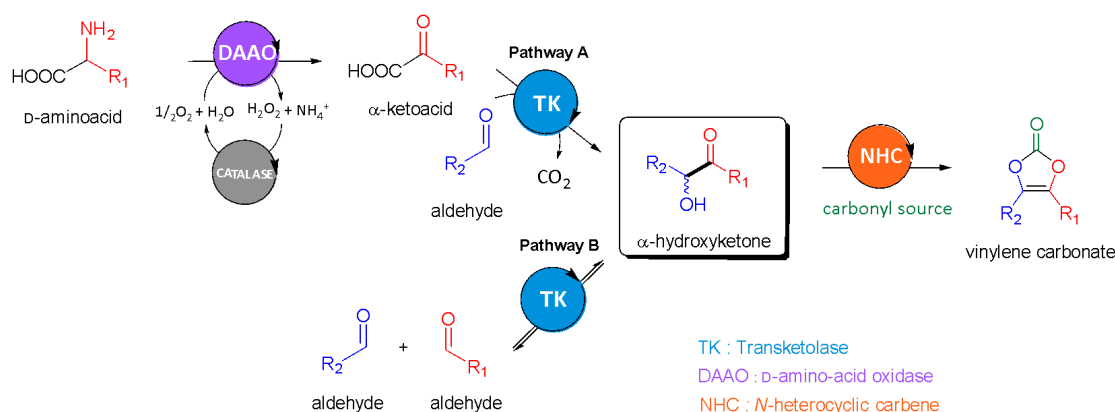


Figure 1: Chemo enzymatic strategy for the synthesis of vinylene carbonate from unsymmetrical α -hydroxyketones

Transketolase (TK) is the key enzyme to obtain unsymmetrical α -hydroxyketones by C-C bond formation. Two pathways **A**^{1,2} and **B** will be investigated. The more challenging pathway B will be based on an unprecedented application of TK promiscuous activity which consists in a cross acyloin-type condensation between two aldehydes, allowing **atom economy** and the use of **cheap substrates**. For both pathways, TK from *Geobacillus stearothermophilus* (TK_{gst}) discovered by ICCF³ will be used as template for its **robustness** and **thermostability**. To improve TK_{gst} activity toward the targeted substrates, variants will be designed by rational mutagenesis based on the analysis of TK_{gst} active site. We will present the first results obtained according both pathways A and B leading to the targeted unsymmetrical α -hydroxyketones.

¹ Université Clermont Auvergne, CNRS, Institut de Chimie de Clermont-Ferrand (ICCF) F-63000 Clermont-Ferrand (France)

REFERENCES:

1. H. Casajus, A. Lagarde, M. Lereboure, T. De Dios Miguel, L. Nauton, V. Thery, W-D. Fessner, N. Duguet, F. Charmantray, L. Hecquet, *ChemCatChem*, **2020**, *12*, 5772-5779.
2. N. Ocal, G. Arbia, A. Lagarde, M. Joly, S. Gittings, K. M. Graham, F. Charmantray, L. Hecquet, *Adv. Synth. Catal.* **2023**, *365*, 78-87.
3. J. Abdoul Zabar, I. Sorel, V. Hélaine, F. Charmantray, T. Devamani, D. Yi, V. de Bernardinis, D. Louis, P. Marlière, W.D. Fessner, L. Hecquet, *Adv. Synth. Catal.* **2013**, *355*, 116-1

Wednesday, 10th of April 2024
Day 1 - Posters

Chemical behaviour of accessory phases along a metamorphic gradient in the Chugach Metamorphic Complex (Alaska)

Théo BIGET

BRUAND Emilie¹, BOYET Maud², PEREIRA Ines³

Laboratoire Magmas et Volcans

The study of accessory phases (e.g. trace elements concentrations and radiogenic isotopes) is nowadays a powerful tool for the understanding of geological processes such as crustal differentiation. They are the main carriers of incompatible elements and Rare Earth Elements (REE) in crustal rocks and play a major role in the enrichment of these elements from the lower towards the upper crustal levels. However, the impact of high-grade metamorphism and crustal anatexis on the chemistry of these accessory phases is not well constrained. Here we present new results acquired from samples from the Chugach Metamorphic Complex in Alaska. This Eocene (55-50 Ma) accretionary prism contains metapelitic and metagreywacke rocks and exposes a systematic N-S metamorphic gradient from greenschist to upper amphibolite facies with anatexis at ~650–750 °C [1, 2]. We present trace element concentration measurements of apatite, monazite and titanite as well as whole-rock and in-situ Nd isotopic compositions of monazite and allanite from a dozen of samples collected along this metamorphic gradient. Trace element contents reveal a strong bulk composition effect (greywacke vs pelite) on the REE signatures of apatite, monazite and titanite in the migmatitic gneisses. In xenotime-bearing pelitic samples, we show that Eu/Eu* and YHREE in both monazite and apatite are very sensitive to temperature at a very fine scale (in a range from ca. 500 to 650°C). Across all analysed samples (schists and migmatites), no significant difference in ϵ_{Nd} between monazite, allanite and whole-rock was found, regardless of the type of rock analysed. This suggests (i) an overall homogeneity of the Nd isotopic composition above 550 °C up to crustal anatexis conditions and (ii) a mineral to whole-rock isotopic equilibrium, implying that in this case the isotopic disequilibrium is very unlikely during partial melting.

¹Laboratoire Geo-Ocean, CNRS, Université de Bretagne Occidentale, France

²Laboratoire Magmas et Volcans, Université Clermont Auvergne, France

³Universidade de Coimbra, Centro de Geociências, Departamento de Ciências da Terra, Portugal

REFERENCES:

[1] Gasser et al., Lithos (2012)

[2] Bruand et al., Lithos (2014)

Photodégradation d'un revêtement organique et influence de la déformation mécanique sur sa durabilité

Nathan LESAGE

Maxime Vienne², Sandrine Therias¹, Pierre-Olivier Bussière¹

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand

Les toitures et bardages métalliques sont fabriqués en acier galvanisé revêtu par une couche de peinture polymère, qui est en général choisie pour son aspect esthétique. Ces aciers sont dits "prélaqués" (par opposition aux aciers post-laqués), c'est-à-dire qu'ils sont déformés mécaniquement (pliage ou profilage) après avoir été peints, ce qui peut causer des différences de contraintes sur la peinture entre les zones pliées et les zones planes. Ces films de peinture, relativement mince (jusqu'à 200 μm en fonction du polymère utilisé, 25 μm dans cette étude), sont la première barrière contre les agressions environnementales (radiations solaires, chaleur, humidité, impacts mécaniques, etc.) et constituent une protection contre ce vieillissement naturel pour l'acier galvanisé [1].

Dans cette étude, un système thermodurcissable polyester-mélatamine a été analysé en fonction de son exposition au photovieillissement artificiel accéléré (SEPAP 12/24), en regardant son comportement de l'échelle moléculaire à l'échelle macroscopique. Ce projet est une collaboration entre l'ICCF et l'entreprise Bacacier (groupe Kingspan).

Les résultats montrent une forte différence de comportement entre les formulations pigmentées et non pigmentées : sans pigments, la photooxydation est homogène dans toute l'épaisseur du film de peinture ; alors qu'avec pigments, on constate que l'extrême surface est très dégradée alors que l'échantillon, dans son ensemble, apparaît beaucoup moins dégradé. Ceci suggère que le cœur de l'échantillon est très peu ou pas dégradé, ce qui implique un fort profil de dégradation dans les échantillons pigmentés. De plus, en observant les échantillons à proximité des zones pliées par Microscopie à Force Atomique (AFM), on remarque que le photovieillissement affecte les propriétés mécaniques de surface : le revêtement se dégrade plus vite au bord des plis que sur la partie plane (loin des plis), ce qui indique une contrainte subie par le film de peinture due à la déformation mécanique.

¹ Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F63000 Clermont-Ferrand, France

² Bacacier Kingspan, 63200 Riom, France

REFERENCES:

[1] Lyon, S. B.; Bingham, R.; Mills, D. J. Advances in Corrosion Protection by Organic Coatings: What We Know and What We Would like to Know. *Prog. Org. Coatings* 2017, 102, 2–7.

Enhancing Agroclimatic Understanding through Advanced Climate Reanalysis

Mariam ER-RONDI

L. Serlet², N. Azzaoui², S. Coly¹, E. Buisson¹, M. Troin^{3,4}

Laboratoire de Mathématiques Blaise Pascal

Agriculture is extremely vulnerable to climate change. The assessment of how the current (and future) climate is suitable for agriculture is essential. Accurately understanding the complex interactions between agriculture systems and climatic conditions require long samples of reliable past (and future) climate datasets describing both spatial and temporal variability. However, obtaining such datasets poses a significant challenge.

To address the lack of observed historical data with appropriate temporal resolution and sufficient local precision, we introduce RFHR (Réanalyse-France à Haute Résolution), a high-resolution (daily and 1 km) advanced climate reanalysis over France, available from 1979 to 2021. RFHR is built upon the widely used ERA5-Land^[1] dataset to provide more accurate climate estimates. It results from a statistical downscaling followed by a bias correction according to the CDF-t^[2] method using the ERA5-Land dataset and observed data available since 2012 on a 1 km grid covering all of France.

To comprehensively evaluate RFHR, we assess its ability to reproduce agro-climatic indicators specific to leading crops in France. RFHR's reliability is further confirmed through comparative analyses against other climate reanalysis products, ensuring a robust understanding of the dataset's strengths and limitations.

This work not only addresses the immediate need for reliable historical climate data for agro-climatic studies but also lays the groundwork for developing future climate projections. Leveraging RFHR, we extend our research to create a forward-looking dataset that offers insights into potential future climatic conditions (horizons 2030, 2040, and 2050), all while maintaining the high spatial and temporal resolution. This initiative aims to contribute valuable insights for anticipating and adapting to future agro-climatic scenarios, thereby supporting sustainable agricultural practices at a local scale in France.

¹ *Weather Measures, ZAC Les Gravanches, 10 Rue Jacques Mailhot, 63100 Clermont-Ferrand, France*

² *Université Clermont Auvergne, CNRS, LMBP, F-63000 Clermont-Ferrand, France*

³ *Hydroclimat, TVT, Maison du Numérique et de l'Innovation, 83000 Toulon, France*

⁴ *Université Côte d'Azur, CNRS, Laboratoire ESPACE, 98 Bd Edouard Herriot, 06204 Nice, France*

REFERENCES:

[1] Muñoz-Sabater, J. et al. (2021). "ERA5-Land: A state-of-the-art global reanalysis dataset for land applications." *Earth Syst. Sci. Data* 13, 4349–4383.

[2] Michelangeli, P.-A. et al. (2009). "Probabilistic Downscaling Approaches: Application to Wind Cumulative Distribution Functions." *Geophys. Res. Lett.* 36, L11708.



Deep eutectic solvent for low temperature CO₂ regeneration in aqueous amine thermomorphic biphasic solvent

Julian Castaneda-Corzo

Karine Ballerat-Busserolles¹, Jean-Michel Andanson¹, Jean-Yves Coxam¹

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand

CO₂ emissions produced by anthropic activities have been recognized as the main factor to contribute to climate change and global warming [1]. Power plants emit one third of worldwide CO₂ emissions. To reduce emissions one strategy consists of capturing the CO₂ from flue gases emitted by power plants. This process is recognized as a promising approach for accomplishing atmospheric CO₂ reductions [2]. Aqueous amine solutions are one advanced option for CO₂ removal. The process is realized in two steps: first, CO₂ is reacting selectively with the amine, then at higher temperature, the solvent is recovered and pure CO₂ is obtained. However, the desorption process is expensive: more than 50 % of the overall operational cost due to high energy consumption for solvent regeneration [1]. One option to reduce operational costs is to design of new solvents.

During my Ph.D., I focused on the development of new solvent based on eutectic mixture composed of oleic acid and lidocaine. This solvent is a homogeneous one phase solution at room temperature and undergoes liquid - liquid phase separation by an increase in temperature[4]. In my work, we first optimize the mixture concentrations to fit the operational condition of the CO₂ capture. Then, we characterized the new solvent by quantifying CO₂ solubility, CO₂ recyclability, kinetics of sorption and desorption of CO₂, viscosity of the solvent as well as liquid – liquid phase equilibria, in order to compare our new solvent to benchmark aqueous amine solutions.

¹ Institut de Chimie de Clermont Ferrand UMR 6296

REFERENCES:

- [1] J. Zhang, Y. Qiao, W. Wang, R. Misch, K. Hussain, et D. W. Agar, *Energy Procedia*, vol. 37, p. 1254-1261, 2013, doi: 10.1016/j.egypro.2013.05.224.
- [2] Q. Li, G. Gao, R. Wang, S. Zhang, S. An, et L. Wang, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, vol. 108, p. 103330, juin 2021,
- [3] J. Zhang, O. Nwani, Y. Tan, et D. W. Agar, *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 89, n° 8, p. 1190-1196, août 2011,
- [4] O. Longeras, A. Gautier, K. Ballerat-Busserolles, et J.-M. Andanson, *Journal of Molecular Liquids*, vol. 343, p. 117628, déc. 2021

Croissance sélective de nanofils d'InGaN et de micro-domaines de GaN par HVPE pour des applications LED

Elias SEMLALI

Agnès Trassoudaine¹, Yamina André¹

Institut Pascal

Actuellement la technologie couramment utilisée dans les écrans de téléviseur est appelée OLED (Organic Light Emitting Diode). Ces dispositifs permettent de convertir l'énergie électrique en énergie de rayonnement, dans le domaine du visible pour l'œil humain. Les matériaux utilisés dans cette technologie, connue du grand public, sont des matériaux dits organiques. Théoriquement, le remplacement de ces derniers par des matériaux inorganiques, par exemple, les nitrures d'éléments III étudiés dans le cadre de ma thèse, pourrait permettre des gains considérables en terme d'efficacité des dispositifs (plus brillant et moins d'obsolescence) [1] [2]. Le principe de fonctionnement de cette technologie est le même que pour les OLED.

La réalisation d'un pixel pouvant restituer une grande gamme de couleur est faite à condition de réunir trois briques de base : la diode bleue, la diode verte et la diode rouge. Théoriquement l'utilisation de nitrure de gallium-indium permettrait d'atteindre ces trois couleurs. En pratique seules les LED bleues nitrure ont été réalisées avec succès jusqu'à maintenant (récompensée d'un prix Nobel en 2014).

L'objectif de mon travail de thèse est de permettre la réalisation de la LED rouge à base de nitrure, la plus difficile à synthétiser des trois. La technique de croissance utilisée est appelée Epitaxie en Phase Vapeur aux Hydrures (EPVH). En utilisant une approche innovante de synthèse par l'EPVH, les structures obtenues peuvent être utilisées comme support pour la réalisation de cette diode électroluminescente. Ces matériaux sont synthétisés à l'échelle nanométrique, c'est-à-dire 1000 fois plus fin que le diamètre d'un cheveu. Cela permet d'améliorer l'efficacité des dispositifs et contourner les problèmes actuellement rencontrés pour la réalisation d'une LED rouge nitrure à plus grande échelle.

¹ *Université Clermont Auvergne, Clermont Auvergne INP, CNRS, Institut Pascal, F-63000 Clermont-Ferrand, France*

REFERENCES:

[1] P. J. Parbrook, B. Corbett, J. Han, T.-Y. Seong, et H. Amano, « Micro-Light Emitting Diode: From Chips to Applications », *Laser & Photonics Reviews*, vol. 15, no 5, p. 2000133, 2021, doi: 10.1002/lpor.202000133.

[2] N. Guan, X. Dai, A. V. Babichev, F. H. Julien, et M. Tchernycheva, « Flexible inorganic light emitting diodes based on semiconductor nanowires », *Chemical Science*, vol. 8, no 12, p. 7904-7911, 2017, doi: 10.1039/C7SC02573D.

Thermodynamic study of working fluid pairs for an absorption refrigeration process

Alaa HAJLAOUI

Y. Coulier¹, L. Rodier¹, J-M. Andanson¹

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand

To overcome the environmental issues associated with the use of conventional compression refrigeration systems and to cope with the rapid growth in energy demand, vapor-absorption refrigeration technology was introduced. It has received growing attention in the past few years thanks to its advantages such as the use of environment-friendly working fluid pairs and the use of residual heat recovered from industrial processes or supplied by renewable sources. Nevertheless, vapor absorption cycle suffers from some limitations including technological concerns with currently used fluid pairs ($\text{H}_2\text{O}/\text{LiBr}$ or $\text{NH}_3/\text{H}_2\text{O}$) and a low coefficient of performance (COP).

To promote this technology, our work focuses on the investigation of new potential natural refrigerant/absorbent pairs. In order to limit the environmental impact, the selected refrigerant is carbon dioxide (CO_2) and the absorbent will be a bio-based solvent (BBS) with low volatility and strong affinity to the former.

In this study four BBSs are investigated namely cyrene, propylene carbonate, anisole and γ -valerolactone. One of the fundamental requirements for absorption refrigeration process is the high refrigerant absorption capacity. Thus, new experimental vapor-liquid-equilibria data for $\{\text{CO}_2+\text{BBS}\}$ systems are determined, using a calorimetric and a spectroscopic technique, at temperatures from 263.15 K to 373.15 K and pressures from 0.5 to 15 MPa. All available experimental data for these systems are used to develop an appropriate thermodynamic model capable of reproducing phase equilibria. Finally, this thermodynamic model is used to compare CO_2 solubility in the four BBSs at the operating conditions of vapor absorption refrigeration cycle.

¹ Université Clermont Auvergne, CNRS, SIGMA Clermont, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND

Conception, synthèse et pharmacomodulation de traceurs fluorescents de protéines « Multidrug Resistance » (MDR)

Elodie GAY

Emmanuelle Mounetou, Pierre Daumar

Imagerie Moléculaire et Stratégies Théranostiques

Les protéines « Multidrug Resistance » (MDR), sont des pompes d'efflux de xénobiotiques exprimées chez tous les organismes et sont localisées au niveau de la membrane cellulaire. En oncologie, ces protéines sont à l'origine du phénomène de « multirésistance » (MDR) conduisant à l'inefficacité des traitements par un efflux cellulaire massif de ces derniers.^[1] Le développement de traceurs fluorescents sélectifs permettant la détection et la quantification des protéines MDR, notamment par des approches d'imagerie, présente donc un réel enjeu. Dans ce contexte, nos travaux portent sur la conception, la synthèse et la pharmacomodulation de ces nouveaux traceurs dont la structure comporte : un ligand, garantissant le ciblage de la protéine, et un fluorochrome, permettant la détection/quantification par fluorescence.^[2,3]

Ce projet est réalisé en différentes étapes :

- La conception, par le choix de ligands sélectifs pour la protéine MDR et les fluorochromes les plus pertinents.
- La mise au point et réalisation des synthèses organiques multi-étapes des traceurs fluorescents visés, ainsi que la caractérisation structurale de chaque composé synthétisé par différentes méthodes analytiques (Résonance magnétique nucléaire (RMN), spectrométrie de masse (HRMS), ou encore par chromatographie liquide (HPLC)).
- L'évaluation biologique *in vitro* des traceurs, réalisée au sein du laboratoire, afin d'étudier leur efficacité et d'orienter les travaux de pharmacomodulation jusqu'à la preuve de concept.

Une utilisation en pratique clinique de ces traceurs innovants pourrait permettre une meilleure prédiction de la réponse aux traitements, et à terme l'optimisation des indications thérapeutiques en oncologie.

REFERENCES:

- [1] Liu, X., Pan, G.; *Advances in Experimental Medicine and Biology*; Springer Singapore: Singapore, 2019; Vol. 1141.
- [2] Daumar, P.; Goisnard, A.; Dubois, C.; Roux, M.; Depresle, M.; Penault-Llorca, F.; Bamdad, M.; Mounetou, E.; *RSC Adv* 13 (39), 27016–27035.
- [3] Goisnard, A.; Daumar, P.; Dubois, C.; Aubel, C.; Roux, M.; Depresle, M.; Gauthier, J.; Vidalinc, B.; Penault-Llorca, F.; Mounetou, E.; Bamdad, M.; *Cancers* 2021, 13 (16), 4050.

Description of the Poly(Glycerol Sebacate) (PGS)-water interface

Xavier DAVOY

Patrice MALFREY¹, Alain DEQUIDT¹, Sébastien GARRUCHET²

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand

As the pharmaceutical industry develops new drugs, their delivery remains critical. Controlled Release Systems (CRS) are more than ever of great interest: they target better, they use less drugs and they last longer than many alternatives. One of the currently studied vehicle is the Poly (Glycerol Sebacate) (PGS)^[1]. It is the product of the polycondensation of glycerol and sebacic acid. However, parameters such as the monomer ratio or the degree of crosslinking influence its properties^[2].

Molecular dynamics (MD) is a powerful method that enables to link the microscopic structure to the PGS network thermodynamics properties. After modeling the PGS network, we propose the analysis of thermodynamic properties such as glass transition temperatures, solid-liquid work of adhesion and contact angle as a function of the degree of crosslinking.

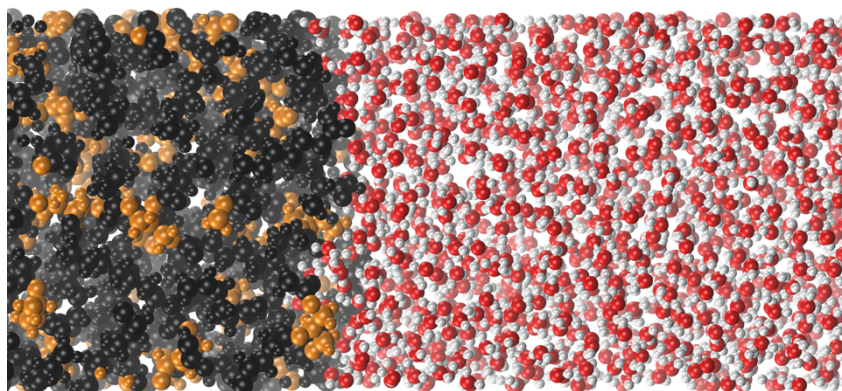


Fig.1 PGS-water interface. PGS is represented in orange (glycerol part) and black (sebacic acid part).

¹ Université Clermont-Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, Institut de Chimie de Clermont-Ferrand, F-63000 Clermont-Ferrand, France

² Manufacture Française des Pneumatiques Michelin, 23 Place des Carmes, Clermont-Ferrand, 63040, France

REFERENCES:

[1] Sun, Z.-J.; Chen, C.; Sun, M.-Z.; Ai, C.-H.; Lu, X.-L.; Zheng, Y.-F.; Yang, B.-F.; Dong, D.-L., *Biomaterials* 2009, 30 (28), 5209–5214

[2] Conejero-García, Á.; Gimeno, H. R.; Sáez, Y. M.; Vilariño-Feltrer, G.; Ortuño-Lizarán, I.; Vallés-Lluch, A., *European Polymer Journal* 2017, 87, 406–419.

Comprendre la formation d'aérosols en atmosphère marine

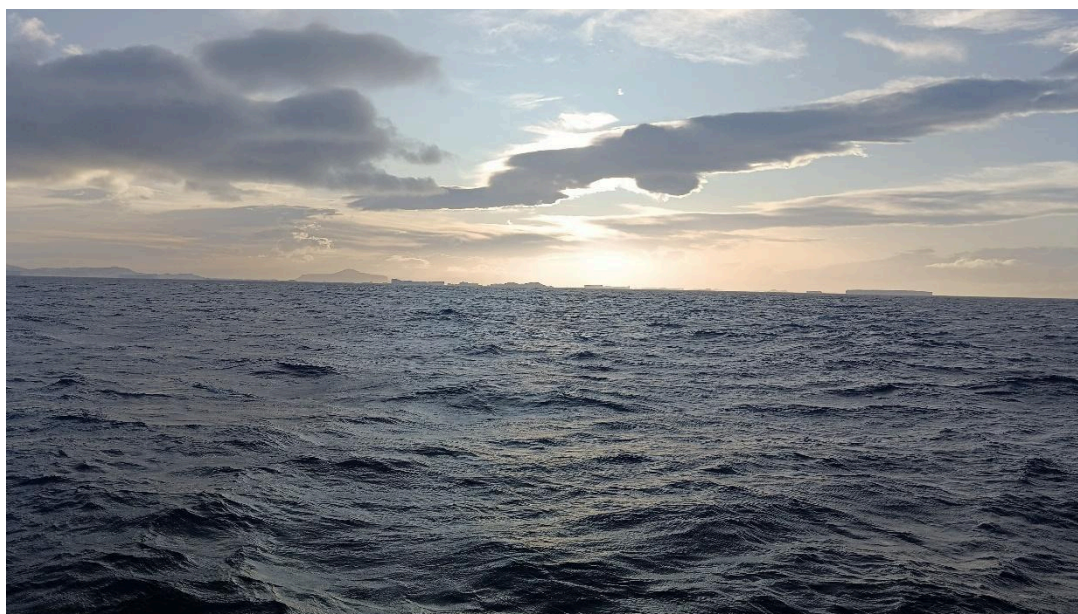
Guillaume CHAMBA

Karine Sellegri¹ et Clémence Rose¹

Laboratoire de Météorologie Physique

Les aérosols sont de petites particules, solides ou liquides, en suspension dans l'atmosphère. Ils représentent un enjeu climatique important car ils interfèrent avec le rayonnement solaire et terrestre, modifiant le bilan radiatif terrestre et sont également au cœur de la formation des nuages. En atmosphère marine, ces aérosols peuvent être émis en tant qu'embruns marins (aérosols primaires) ou se former à partir de précurseurs gazeux émis par les océans (aérosols secondaires). Cette formation d'aérosols secondaires que l'on appelle nucléation est encore très mal documentée et peu comprise en milieu marin, entraînant une mauvaise prise en compte des aérosols dans les modèles, tant sur leur concentration que leurs propriétés. Il est donc essentiel de mieux comprendre les flux de composés chimiques précurseurs d'aérosols et de faire le lien avec la biogéochimie marine.

L'objectif de ces travaux est d'identifier les mécanismes de nucléation de ces composés amenant à la formation d'aérosols, leurs précurseurs gazeux ainsi que les micro-organismes marins qui les émettent. Pour cela des campagnes océanographiques ont été menées dans L'Océan Austral et le Pacifique Sud, incluant des mesures atmosphériques et des expériences en mésocosmes avec des outils de spectrométrie de masse avancée.



¹ Université Clermont Auvergne, CNRS, Laboratoire de Météorologie Physique, Clermont-Ferrand F-63000, France

Un volcan sous Clermont-Ferrand ? Reconstitution de son activité éruptive et origine de son explosivité

Rémy JUBERTIE

Lucia Gurioli¹, Catherine Deniel¹

Laboratoire Magmas et Volcans

Les maars sont des volcans ayant un large cratère, entouré d'un anneau d'éjectas de faible hauteur et issus d'éruptions de faibles volumes. Malgré le faible volume de magma émis, ces éruptions demeurent fortement explosives. La question se pose alors de savoir quels sont les mécanismes à l'origine de cette explosivité. Pour cela, il est couramment admis que ce type d'édifice est issu de l'interaction entre du magma et de l'eau. L'objectif de cette étude vise à caractériser l'influence que peuvent avoir les roches encaissantes du maar lors de la fragmentation, c'est-à-dire au moment de l'interaction eau-magma. Le maar de Jaude, mis en place il y a 150 000 ans ^[1] et situé sous la ville de Clermont-Ferrand va nous servir de cas d'étude.

Une démarche basée sur les observations de terrain et couplée à une caractérisation physique des dépôts en laboratoire a été choisie. Concernant la partie terrain, une analyse détaillée des différentes couches a été appliquée pour décrire toute la séquence éruptive et remonter aux mécanismes de mise en place des dépôts. Pour la partie caractérisation physique des échantillons, différentes échelles d'observation ont été employées, en partant de la taille des blocs sur le terrain (> 63 mm) et en allant jusqu'à des échelles microscopiques.

Les observations de terrain montrent que les dépôts se sont mis en place sous forme d'écoulements pyroclastiques principalement, avec quelques niveaux de retombées. En comparant les échantillons à différentes tailles de grains, les fragments de roche issus de l'encaissant du maar de Jaude sont plus abondants dans les gammes de taille les plus petites. Cette observation suggère un modèle d'interactions entre le magma et des sédiments gorgés d'eau. La question se pose désormais si ce type d'interaction entre le magma et de l'eau « non pure » a des conséquences sur la fragmentation du magma.

¹ *Laboratoire Magmas et Volcans, Université Clermont Auvergne, CNRS, IRD, OPGC, 63178 Aubière, France*

REFERENCES:

[1] Raynal JP, Daugas JP, Paquereau MM., Miallier D., Fain J., Sanzelle, S. (1982). Première datation du maar basaltique de Clermont-Ferrand (Puy de Dôme, France) : stratigraphie, palynologie, thermoluminescence.

La conjecture de Lusztig

Emilien ZABETH

Simon RICHE (*UCA, LMBP*), Geordie Williamson (*University of Sydney*)

Laboratoire de Mathématiques Blaise Pascal

La théorie des représentations est un domaine des mathématiques qui permet de formaliser la notion de symétries d'un espace. Depuis le vingtième siècle, ce formalisme a accompagné des avancées importantes dans des sujets aussi variés que la théorie des nombres (via le programme de Langlands) ou la physique théorique. Certaines questions fondamentales concernant cette théorie sont cependant toujours ouvertes. Dans ma thèse, je cherche à étudier ces questions en utilisant des outils issus de la géométrie algébrique et de la combinatoire.

Plus précisément, prenons un groupe G (par exemple le groupe des matrices inversibles de tailles $n \times n$, où n est un entier positif). Une représentation de G est un espace vectoriel V , muni d'une action (linéaire) de G . Lorsque l'espace V est défini sur le corps des nombres complexes, les représentations de G sont bien comprises. Lorsque le corps de base est de caractéristique positive (dépendant d'un nombre premier p), l'étude des représentations de G est alors plus compliquée. En 1980, George Lusztig a formulé une conjecture concernant les dimensions des représentations irréductibles en caractéristique p et mettant en jeu des objets combinatoires simples et indépendants de p , appelés polynômes de Kazhdan-Lusztig. Durant les trois décennies suivantes, la résolution de cette conjecture a motivé de nombreux travaux, qui ont notamment permis une démonstration dans le cas où p est «très grand».

Pendant longtemps, cette hypothèse de caractéristique grande est restée un obstacle mystérieux, jusqu'à des travaux récents (2013) de Geordie Williamson qui ont montré que la conjecture de Lusztig est en fait fautive sous les hypothèses attendues. Dès lors, des efforts considérables ont été entrepris afin de trouver un énoncé de remplacement. Il apparaît désormais que la combinatoire appropriée doit faire intervenir les « p -polynômes de Kazhdan-Lusztig», dépendant du nombre premier p .

Le but de cet exposé sera d'expliquer la signification de la conjecture de Lusztig, en illustrant l'aspect combinatoire et la différence entre les polynômes de Kazhdan-Lusztig et leurs p -analogues.

Synthèse et évaluation biologique de molécules hétérocycliques à visée anti-leucémique

Théo FRAZIER

Fabrice Anizon¹, Pascale Moreau¹

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand

Le fonctionnement du corps humain fait intervenir de nombreuses protéines, parmi lesquelles les protéines kinases jouent un rôle crucial dans la régulation des processus biologiques. Parmi les plus de 500 protéines kinases humaines, les Pim (Pim-1, Pim-2, Pim-3) sont connues pour jouer un rôle dans le développement de cancers tels que les leucémies et le cancer du côlon [1]. Ainsi, le groupe Inhibiteurs d'Enzyme et de Récepteur (IER) de l'ICCF travaille depuis plusieurs années sur la conception et la synthèse de nouvelles molécules hétérocycliques capable d'inhiber les protéines kinases Pim. Le but est de développer de nouveaux composés anticancéreux. Récemment, le groupe a identifié le composé **I** comme un puissant inhibiteur des trois isoformes de Pim avec cependant une activité anticancéreuse modérée (Figure 1) [2]. Dans le but d'améliorer la solubilité dans l'eau et l'activité biologique de **I**, des motifs sucres (β -D-glucosyles) ont été introduits en position 12 et 13. Malheureusement les composés **II** et **III** ont montré une perte totale d'activité inhibitrice sur Pim [3]. Dans les travaux présentés ici, une trentaine de nouveaux analogues substitués en position 12 et 13 ont été synthétisés et évalués biologiquement pour leur activité inhibitrice de Pim et leur cytotoxicité vis-à-vis de cellules leucémiques.

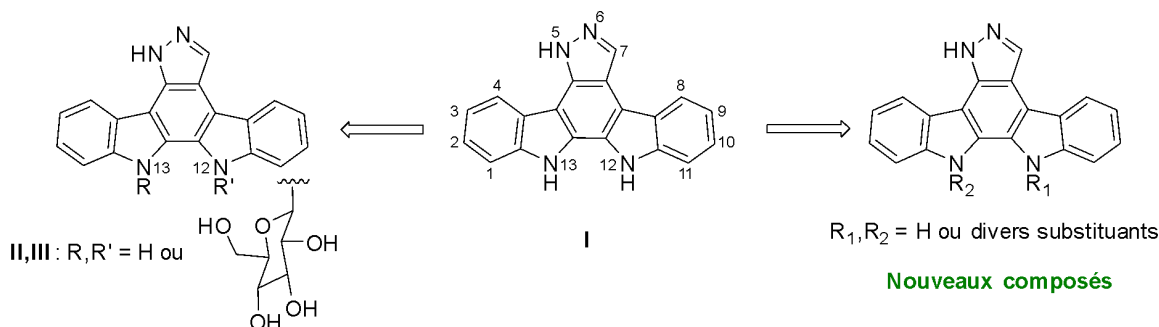


Figure 1 : Structures des molécules précédentes **I** à **III** et des nouveaux composés.

¹ Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 Clermont-Ferrand

REFERENCES:

- [1] a) L. S. Chen et al. *Blood* **2011**, *118*, 693-702. b) R. Bjørnstad et al. *Mol. Cancer Ther.* **2019**, *18*, 567-578. c) U. Weirauch et al. *Neoplasia* **2013**, *15*, 783-794.
 [2] Y. J. Esvan, et al. *Bioorg. Med. Chem.* **2016**, *24*, 3116-3124.
 [3] B. Douara, Y. J. Esvan, et al. *Tetrahedron* **2018**, *74*, 892-901.

Thursday, 11th of April 2024
Day 2 - Posters

Fermat, Wiles et le découpage d'hypercubes

Martin AZON

Nicolas Billerey, Richard Griffon

Laboratoire de Mathématiques Blaise Pascal

Le théorème de Pythagore affirme que les trois côtés d'un triangle rectangle vérifient l'équation $x^2 + y^2 = z^2$. On peut énoncer ce théorème en disant que, sous certaines conditions géométriques, un carré de côté z peut se découper en deux carrés de côtés respectifs x et y .

Depuis l'époque de Pythagore on sait construire des triangles rectangles dont les côtés soient des nombres entiers. Ceci signifie qu'il existe des triplets d'entiers satisfaisant l'équation ci-dessus: on peut découper un carré de côté entier en deux carrés de côtés entiers.

Qu'en est-il si l'on raisonne avec des cubes plutôt que des carrés? Ou même en dimension supérieure? Il s'agit de considérer l'équation $x^3 + y^3 = z^3$, ou de façon plus générale l'équation $x^n + y^n = z^n$, où n est un entier fixé. La question naturelle qui se pose est la suivante: peut-on trouver des triplets d'entiers qui soient solution de l'équation? Peut-on découper un (hyper)cube de côté entier en deux (hyper)cubes de côtés aussi entiers?

C'est Pierre de Fermat qui, en 1637, affirme que la réponse est non: si n est supérieur ou égale à 3, l'équation n'admet pas de solutions entières. Depuis on connaît cet énoncé comme le dernier théorème de Fermat. Il fallut attendre 1995 jusqu'à obtenir une preuve complète, établie finalement par Andrew Wiles. Cette démonstration utilise des outils mathématiques très différents, allant de l'algèbre à l'analyse tout en passant par la géométrie.

Dans mes travaux de recherche, j'étudie des équations similaires, où l'on modifie légèrement les puissances pour obtenir $x^p + y^p = z^q$ par exemple. J'expliquerais les grandes lignes de la méthode de raisonnement pour montrer qu'une telle équation n'admet pas de solutions entières.

REFERENCES:

[1] Paulo Ribenboim. 13 Lectures on Fermat's Last Theorem. Springer-Verlag.

[2] Simon Singh. Fermat's Last Theorem. Fourth Estate.

[3] Andrew Wiles. Modular elliptic curves and Fermat's Last Theorem. Annals of Mathematics.

Sensitivity study of oceanic DMS concentrations on simulated atmospheric DMS

Romain SALIGNAT

S. Banson¹, A. Lupascu², J. Uitz³, S. Berthet⁴, K. Sellegri¹, C. Rose¹

Laboratoire de Météorologie Physique

Atmospheric aerosol particles play a crucial role in the Earth's radiative balance, particularly due to their role in cloud formation as cloud condensation nuclei (CCN). Dimethyl sulfide (DMS), an ocean-emitted volatile compound, is considered the largest natural sulfur emissions to the global atmosphere. In the remote marine atmosphere, the biogeochemical cycle of DMS is thought to play a significant role in the Earth's climate system, by producing sulfuric acid, a key species for aerosol nucleation. DMS is the main, and often only, gas precursor for new particle formation (NPF) of marine origin implemented in chemistry-transport model (CTMs) and climate models. To prescribe a representation of the global concentration of seawater DMS, observational-based climatologies are used by such models. However, the lack of oceanic DMS measurements in the remote marine environment results in a large source of uncertainty, which can lead to errors in the representation of seawater DMS. Recently, Rocco et al., (submitted) quantified a relationship between oceanic DMS and nanophytoplankton abundance by combining shipborne Air-Sea Interface Tank and ambient surface oceanic DMS data during the Sea2Cloud campaign. Combining this relationship with the cell abundance of phytoplanktonic groups available as satellite products, we can provide an alternative DMS climatology. With the aim of improving the consideration of DMS in models, we examined here the incorporation of a realistic oceanic DMS variability in the WRF-Chem regional model based on the work of Rocco et al., (submitted) and surface nanophytoplankton cell abundances from satellite retrievals of Uitz et al., (2006) [1]. We also tested the sensitivity of atmospheric DMS to six seawater DMS climatologies available in the literature. Climatologies based on observations, derived from satellite-retrieved chlorophyll-a, computed with an artificial neural network, or from a biogeochemical model were used. For these purposes, we included in WRF-Chem, a simplified representation of the DMS gas phase chemistry based on the developments of Marelle et al., (2017) [2]. Comparisons with observations obtained in the framework of the ERC Sea2Cloud project [3] were carried out to study the impact of seawater DMS climatologies on atmospheric DMS simulated.

¹ Université Clermont Auvergne, CNRS, LaMP, Clermont-Ferrand, France

² ECMWF, Bonn, Germany

³ Laboratoire d'Océanographie de Villefranche, CNRS UMR 7093

⁴ CNRM, Université de Toulouse, Météo-France, CNRS, Toulouse, France

REFERENCES:

- [1] Uitz et al., (2006). J. Geophys. Res., 111
- [2] Marelle et al., (2017). Atmos. Chem. Phys., 15, 12283-12313
- [3] Sellegri et al., (2023). Bull. Amer. Meteor. Soc.



Conception bio-inspirée d'architectures moléculaires amphiphiles pour combattre les infections bactériennes

Cassandra GUERINOT

Sophie Faure¹, Olivier Roy¹

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand

Les peptides antimicrobiens (PAMs) sont considérés comme des composants clés du système immunitaire inné. Leur intérêt repose sur leur large spectre d'activité et leur faible émergence de résistance, faisant d'eux une bonne alternative aux antibiotiques actuels. Malheureusement, leur utilisation thérapeutique est souvent entravée par une mauvaise pharmacocinétique et un coût élevé. Ces peptides naturels sont devenus une grande source d'inspiration pour le développement de nouveaux agents antimicrobiens. Divers peptidomimétiques ont été conçus pour reproduire le mécanisme d'action des PAMs tout en améliorant la stabilité protéolytique. Parmi eux, les peptoïdes (oligomères de glycine N-substitués) représentent une classe unique de peptidomimétiques avec un grand potentiel comme antimicrobiens.¹ Leur squelette composé d'une répétition d'amides *N,N*-disubstitués leur confère une bonne résistance à la dégradation enzymatique. Ils possèdent également une meilleure flexibilité grâce à l'absence de liaison hydrogène intramoléculaire et à l'isomérisation *cis/trans* des amides. En contrôlant cette isomérisation, les peptoïdes peuvent adopter des structures secondaires héliocœdales stables.² Ce travail consiste à synthétiser des oligomères linéaires et cycliques avec des chaînes latérales hydrophobes et cationiques afin d'imiter la structure amphiphile cationique des PAMs. Les peptoïdes conçus sont polycationiques grâce à l'ajout de chaînes latérales de type triazolium imposant également des contraintes conformationnelles pour induire une structure secondaire stable.^{3,4} ⁴Nous présenterons ici la conception et la synthèse en phase solide d'oligomères linéaires et cycliques, nous donnerons un aperçu de leurs préférences conformationnelles et enfin nous présenterons leur évaluation biologique réalisée au LMGE sur un panel de souches bactériennes à Gram négatif et à Gram positif.

¹ Université Clermont Auvergne, Clermont Auvergne INP, CNRS, ICCF, F-63000 Clermont-Ferrand, France

REFERENCES:

- [1] N.P. Chongsiriwatana, J.A. Patch, A. M. Czyzewski, M.T. Dohm, A. Ivankin, D. Gidalevitz, R. N. Zuckermann, A.E. Barron, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 2008, *105*, 2794.
- [2] O. Roy, G. Dumonteil, S. Faure, L. Jouffret, A. Kriznik, C. Taillefumier, *J. Am. Chem. Soc.* 2017, *139*, 13533.
- [3] R. Shyam, N. Charbonnel, A. Job, C. Blavignac, C. Forestier, C. Taillefumier, S. Faure *ChemMedChem* 2018, *15*, 1513.
- [4] R. Shyam, C. Forestier, N. Charbonnel, O. Roy, C. Taillefumier, S. Faure *EurJOC* 2021, *42*, 5813.

Next Generation of Li/CF_xMnO₂ primary lithium batteries for space applications

Louise DAUGA

Katia Guérin¹, Marc Dubois¹, Diane Delbègue², Yannick Borthomieu³

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand

Industrial applications for primary lithium batteries are developing rapidly in the fields of intelligent energy management, such as smart communicating meters, or vehicle fleet management, limiting greenhouse gas emissions. They also regard the space field and more particularly the energy management for space exploration applications when a solar array is not available to recharge a Li-ion battery. In this case, MnO₂-CF_x primary lithium battery could replace the conventional LiSO₂ primary batteries which have been used for Philae and MASCOT projects. Therefore, it is necessary to maximize both the energy density and the power of these systems. Li/CF_x have a theoretical capacity as high as 865 mAh/g. However, the electrical conductivity of CF_x is very low due to the sp³ hybridization of carbon involved in covalent C-F bonds, inhibiting the use of CF_x in high-power devices. To tackle the insulating property of CF_x, it has been mixed with more conductive materials through coating or simply by preparing a composite material. MnO₂ has shown to be a good candidate to mix with CF_x as it has a good rate capability [1].

In this work, a particular phase of sub-fluorinated graphite was synthesized and mixed with MnO₂ through mechanical ball-milling to favor intimacy of both phases. We show how this particular phase with F/C around 0.5 and high structural homogeneity impacts the performance of a CF_xMnO₂ hybrid material.

¹ Institut de Chimie de Clermont-Ferrand, 63000, Clermont-Ferrand, France

² Centre National des Etudes Spatiales, 31401, Toulouse, France

³ SAFT, Space and Defense Division, 86060, Poitiers, France

REFERENCES:

[1] D ; Wang, G. Wang, Z.Zhang, Y. Cui, J. Yu, S. Shi, J.Power Sources (2022), 231716

Inundation and evacuation of shoreline populations during landslide-triggered tsunamis: An integrated numerical and statistical hazard assessment

Emmie M. BONILAURI

Andrew J.L. Harris¹, Raphaël Paris¹ & Catherine Aaron²

Laboratoire Magmas et Volcans

The volcano island of Stromboli (Italy) is known for its local tsunamis generated by landslides in the Sciara del Fuoco, as demonstrated by the events of December 2002 when a tsunami with a run-up of 10 m inundated coastal areas. With a very short warning time ranging from less than a minute to only a few minutes, mitigation efforts and evacuation from the Strombolian coast must be carefully planned [1]. As a result sea-floor detection systems have been installed, linked to on-shore sirens.

However, with the exception of the December 2002 events little natural data are available for tsunami hazard assessment at Stromboli, so numerical modelling of tsunamigenic landslides for several positions, volumes and densities was required. Our numerical modelling was used to create 156 tsunami and coastal inundation extent models, and 156 tsunami beacon signals were produced and linked to their associated hazard scenario. Inundated zones were statistically merged with population distributions varying with season and time-of-day. This resulted in the creation of 156 specific evacuation models, with routes and times to reach a safe area from every pixel in the inundated area, and appraisal for the time needed to escape versus the wave arrival time. The creation of an impact score linking the predicted inundation extent and the tsunami beacon signals for each hazard scenario allows assessment of the extent of any future tsunami, and to adapt evacuation plans accordingly.

Evacuating an island hosting several thousand tourists every summer with very little warning time supports the absolute necessity for such mitigation efforts, aimed at informing hazard planners and managers, and all other stakeholders.

¹*Université Clermont Auvergne, CNRS, IRD, OPGC, Laboratoire Magmas et Volcans, Clermont – Ferrand, France*

²*Université Clermont Auvergne, CNRS, Laboratoire de Mathématiques Blaise Pascal, Clermont – Ferrand, France*

REFERENCES:

[1] Bonilauri, E. M., Harris, A. J. L., Morin, J., Ripepe, M., Mangione, D., Lacanna, G., Ciolli, S., Cusolito, M., and Deguy, P: Tsunami evacuation times and routes to safe zones: a GIS-based approach to tsunami evacuation planning on the island of Stromboli, Italy, *Journal of Applied Volcanology*, 10, 4, <https://doi.org/10.1186/s13617-021-00104-9>, 2021.

Copper, cobalt, and iron trifluoride from the insertion of fluorine into a LDH template

Abderraouf ROUAG

Katia Guérin, Fabrice Leroux, Kevin Lemoine, Cristina Iojoiu, Diane Delbègue

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand

The advancement of lithium-ion batteries (LIBs) with high performance is crucial across various sectors, notably in space exploration. This advancement hinges on the development of innovative cathode materials. Our research is dedicated to pioneering a new category of cathodes using fluorinated multimetallic materials, with a specific focus on diverging from the traditional Ni, Co, and Mn-based NMC chemistries by substituting nickel and manganese with copper and iron which are more sustainable elements. Our goal is also to create more stable cathodes thanks to introducing fluorine instead of oxygen as metal ligand. To achieve this, an intimate composite blend of CuF_2 , FeF_3 , and CoF_2 through the Multi-Metallic Template Fluorination (MMTF) methodology using a Layered Double Hydroxide (LDH) as a precursor has been designed. Each of these components was carefully selected for its distinct attributes, including high redox potential, elevated energy density, substantial theoretical capacity, and improved cyclability. A ternary diagram (Mg-Co-Cu) representative of the divalent part of a potential LDH was constructed to determine the stability of a lamellar LDH and to maximize its Co-Cu part. A promising theoretical composition denoted as $(\text{Cu}_{1.5}\text{Co}_{0.5})^{2+}(\text{Fe}_{0.75}\text{Al}_{0.25})^{3+}$ has been obtained. Subsequently, this particular LDH was fluorinated through solid-gas fluorination at different temperatures (200, 350, and 500 °C) using gaseous molecular fluorine (F_2). A comprehensive characterization of these materials using various techniques, including X-ray Diffraction (XRD), Mossbauer spectroscopy, Scanning Electron Microscopy with Energy Dispersive X-ray Analysis (SEM-EDX), and Inductively Coupled Plasma analyses (ICP) was conducted and the fluorination mechanism has been deeply scrutinized revealing an intermediate porous texture particularly sensitive to hydration. Two original crystallographic phases are else obtained: one formed by the hydration of the amorphous intermediate compound: $\text{Cu}_3\text{Fe}_{1.5}\text{Al}_{0.5}\text{F}_{12}(\text{H}_2\text{O})_{12}$ an anti-perovskite structure and another stabilized through the combination of solid gas fluorination and LDH precursor yielding an original CoAlF_5 -type phase.

¹Thématique MF2 - Fluorination et Matériaux Fluorés

²Thématique HDL - Hydroxydes Doubles Lamellaires

REFERENCES:

Eveillard F, Leroux F, Batisse N, Delbègue D, Guérin K. Copper-ion ternary metal fluorides from multi-metallic template fluorination and their first use as cathode in solid state Li-batteries. *J Solid State Chem.* 2022;310(November 2021). doi:10.1016/j.jssc.2022.123031

Retracer le couplage entre les parties internes et externes de la Terre primitive: un super pouvoir des isotopes d'oxygène et de silicium

Steve KITOGA

Laboratoire Magmas et Volcans

Mon travail cherche à établir si la terre externe et la terre interne étaient déjà couplés par des processus de subduction au moment de la formation des roches les plus vieilles de notre planète. Nous avons trouvé des signatures particulières en isotopes de silicium et d'oxygène au sein des roches ayant résidé en contact avec l'eau de mer sur la terre primitive (i.e. la partie supérieure de la croûte océanique). Ces signatures nous ont permis de démontrer que des roches altérées par l'eau de mer à la surface de la Terre primitive étaient systématiquement recyclées vers la source profonde des granitoïdes contemporains, bien préservés dans la ceinture des roches vertes de Barberton. Ces résultats nous permettent d'établir qu'il y avait déjà couplage entre la terre externe et la terre interne au moment de la formation des roches les plus vieilles de la Terre, communément appelées ceintures de roches vertes. Ces résultats permettent aussi de remettre en cause les idées antérieures selon lesquelles la Terre fonctionnait d'une manière complètement différente de son fonctionnement actuelle pendant la formation des ceintures des roches vertes.

Synthesis of BiVO_4 thin films deposited by reactive magnetron co-sputtering for the visible light photocatalysis

Mathias GOUTTE

Angélique BOUSQUET¹, Éric TOMASELLA¹, Guillaume MONIER², Thierry SAUVAGE³

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand

Solar energy is the most abundant energy on the Earth's surface. If properly harnessed, it could satisfy the world-wide annual consumption. Unfortunately, solar energy accounts for just 5% of the global energy mix. The current limitations are mainly due to the efficiency of the means of conversion, but also to the storage of the energy created. It's intermittent and therefore not very available at peak energy consumption times, which is why it needs to be accumulated for later distribution. Among the ways of harnessing solar energy (photovoltaics, solar thermal), photocatalysis has emerged as a viable solution in order to create new synthesis path for the production of energy carriers like H_2 by water splitting. Common used photosensitive semiconductors (called photocatalysts) have limited performances due to their low absorption in the solar visible range and to their high recombination rate of photogenerated charges. Bismuth vanadate BiVO_4 , is an interesting low band gap photocatalyst which makes it able to harvest visible light and has suitable band positions to be used as photoanode for H_2 production¹. In this work, we aim to demonstrate how a synthesis path called reactive magnetron co-sputtering allows to make BiVO_4 thin films and to adjust materials characteristics such as the composition, the structure and the morphology. Physical Vapor Deposition is a versatile thin films deposition technique based on the sputtering of metallic targets by high-energy particles from a plasma. In fact, when these incident particles impact the target, atoms are sputtered, travel through the plasma and join the substrate where they'll form the layer. By tailoring the synthesis settings, we are able to deposit thin films with different composition ratios and direct band gaps between 2,4 and 2,6 eV. Photocatalytic performances are then evaluated by degradation of pollutant and photoelectrochemical measures as photoanode under irradiation. All the films were able to degrade methyl-orange solution and to generate a photocurrent. However, interesting properties differences highlighted the impact of materials features like electronic structure, porosity and crystallinity on photocatalysis.

¹Université Clermont Auvergne, Clermont Auvergne INP, CNRS, Institut de Chimie de Clermont-Ferrand (ICCF), F- 63000 Clermont-Ferrand, France.

²Université Clermont Auvergne, Clermont Auvergne INP, CNRS, Institut Pascal, F- 63000 Clermont-Ferrand, France.

³CNRS, UPR 3079, CEMHTI, Université Orléans, Orléans, F-45071, France.

REFERENCES:

- (1) Park, Y.; McDonald, K. J.; Choi, K.-S. Progress in Bismuth Vanadate Photoanodes for Use in Solar Water Oxidation. *Chem Soc Rev* **2013**, 42 (6), 2321–2337. <https://doi.org/10.1039/C2CS35260E>.

Quantification des Microplastiques par cytométrie en flux, Perspectives et problématiques

Lucas AINE^{1,2}

Jean-Michel Andanson¹, Justine Jacquin², Florence Delor-Jestin¹

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand

Les microplastiques (MP) sont des contaminants dont la découverte est relativement récente et constituent une préoccupation sanitaire et environnementale pour notre société. Leur quantification est cruciale pour de nombreuses problématiques. Leur taille, mais aussi leur omniprésence rendent cette quantification chronophage et laborieuse, accompagnée par la nécessité d'une distinction avec les autres particules présentes dans l'échantillon [1].

Une méthode, basée sur le marquage fluorescent, suivi d'une analyse en cytométrie en flux (CF), a vu le jour au cours de ces dernières années [2]. Adaptée des analyses biologiques utilisées en bactériologie ou en médecine, elle permet de rapidement détecter et quantifier des MP aux tailles comprises entre 200nm et 100µm. Elle consiste à réaliser un marquage fluorescent des MP avec le composé Nile Red afin de les rendre différenciables optiquement, puis à utiliser la CF pour compter chacune des particules individuellement. Ainsi, les MP marqués seront quantifiés sans déterminer leur composition précise. En théorie, cette méthode apporte des améliorations très intéressantes sur la problématique d'analyse des MP. Cependant, plusieurs obstacles significatifs, restent à être levés, notamment révélés par l'ajout récent d'un complément à la CF permettant l'obtention d'images sur les particules quantifiées.

Nous proposons ici une description de la méthode et de ses intérêts, mais aussi une énumération des différentes problématiques. Les facteurs analytiques impactant sont abordés, avec à l'appui les récentes observations réalisées sur le développement de cette méthode. La problématique de coloration au Nile Red dans un milieu aqueux polaire entraîne une précipitation du fluorochrome et la formation de cristaux constituant une source importante de faux-positifs. De plus, l'aspiration d'une fraction volumique par le fond du récipient pour l'analyse en CF nécessite une homogénéité de l'échantillon difficilement atteignable pour un mélange eau-plastique. Enfin, les interactions entre les MP et les parois plastiques de l'appareil peuvent conduire à une fixation des MP sur ces parois et fausser les résultats, entraînant des sous-estimations ou des surestimations lors des analyses ultérieures. Ces observations nous amènent à remettre en question la validité des résultats obtenus avec cette méthode et à mettre en lumière des facteurs importants à considérer pour son développement.

¹ ICCF, Université Clermont Auvergne, 63000 Clermont-Ferrand, France

² Centre technique Industriel de la Plasturgie et des composites, 01100 Bellignat, France

REFERENCES:

- [1] Primpke et al., 2020. Critical Assessment of Analytical Methods for the Harmonized and Cost-Efficient Analysis of Microplastics
 [2] Kaile et al., 2020. A rapid-screening approach to detect and quantify microplastics based on fluorescent tagging with Nile Red

Etude géophysique et structurale multi-échelle en milieu extrême : prospection magnétique du site éruptif de septembre 2022 au Piton de la Fournaise

Romain GUILLARD

Lydie Gailler¹, Erwan Thébaud¹, Philippe Labazuy¹

Laboratoire Magmas et Volcans

Le Piton de la Fournaise est un volcan bouclier basaltique issu du fonctionnement d'un point chaud asthénosphérique. Situé sur l'île de La Réunion dans l'Océan Indien, le Piton de la Fournaise entre en éruption une à deux fois par an en moyenne. C'est cette activité fréquente qui en fait un site d'étude majeur permettant ainsi d'observer des changements d'états plus ou moins rapide. C'est dans cette perspective d'imagerie structurale et de quantification de fonctionnement de l'édifice qu'une mission de prospection géophysique aéroportée multiparamètres, i.e. en imagerie magnétique, visible et thermique infra-rouge, a été organisée en novembre 2022. Cette mission se focalise sur le site de l'éruption de septembre 2022 ayant formé le Piton Tikal à la base du Cône Central au sud. L'utilisation d'un drone pour de telles mesures a été nécessaire et se justifie par le caractère dangereux et chaotique de la surface de la coulée de lave partiellement refroidie ainsi que par une importante superficie à couvrir de l'ordre du km². Les mesures du champ magnétique terrestre sont très pertinentes en contexte volcanique en raison de la nature des roches qui sont généralement fortement aimantées (due à des teneurs importantes en minéraux de type magnétite / titanomagnétite). L'activité volcanique ayant tendance à désaimanter les roches, les anomalies magnétiques mesurées seront donc des indicateurs de l'état du site et des structures potentielles en profondeur.

Les relevés thermiques aéroportés nous indiquent une coulée de lave partiellement refroidie et encore chaude dans sa partie centrale deux mois après la fin de l'éruption, ce qui traduit une ré-aimantation partielle de celle-ci. Ils mettent également en évidence des anomalies thermiques radiales sur le flanc ouest du Piton Tikal qui s'apparentent à des zones de fractures de haute porosité très probablement liées à une instabilité gravitaire du flanc du cône de scorie.

Les données magnétiques permettent, grâce à l'élaboration de modèles numériques 2D et 3D, l'identification de structures à différentes échelles : i) des structures superficielles au sein des coulées, tel que des tunnels de lave de grande dimension, ii) des structures plus importantes, les coulées elles-mêmes et iii) une structure de grande dimension, se prolongeant en profondeur et pouvant être associée à une zone de fragilité mécanique de l'édifice dans un axe préférentiel d'intrusions magmatiques.

¹ Laboratoire Magmas et Volcans, CNRS, IRD, OPGC, Université Clermont Auvergne, 63170 Aubière, France

Water scarcity and wastewater treatment : effects on macro and micropollutants in Alpine streams

Silvia Bertolotti

M. Sarakha¹, M. Minella², S. Fenoglio³

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand

The rising temperatures and the altered precipitation patterns are determining heavy reductions in the natural regimes of water courses and a deterioration of water quality, which conflicts with the increasing demand of this resource (Beniston et al., 2014). In this context, the emissions from anthropogenic sources as wastewater treatment plants (WWTPs) may have a more severe effect on water bodies, as their less dilution power may result into excessive concentration of nutrients, pollutants and pathogens. So far, the studies on this issue have been focused on intermittent water courses of semi-arid or Mediterranean regions (Castelar et al., 2022), but few mention has been done on Alpine rivers, always considered the safest and most abundant water sources for Europe. This study aimed at investigating the response of three Alpine rivers (Stura di Lanzo, Malone and Pellice, located in Piedmont, NW Italy) to the severe drought conditions that occurred in Italy in 2022 and the effects of WWTPs effluents on the final concentration of nutrients in the water body. A monitoring campaign of one year was set and 1 dm³ of water was collected monthly upstream (U), at the discharge (W) and downstream (D) of a local WWTP. The concentration of Cl⁻, NO₃⁻, PO₄³⁻, SO₄²⁻, NH₄⁺, Na⁺, K⁺, Mg₂⁺, Ca₂⁺, TC, TN, N-NH₃, N-NO₂, SiO₂, P and anionic surfactants was measured for each sample, while other parameters (e.g. T, pH, EC, water depth...) were measured on field. A multivariate analysis approach was then applied to highlight possible correlations between the selected variables and the flow regimes. Comparing upstream and downstream sections, it was observed that WWTP effluents are effectively drivers of high amounts of nutrients under the studied conditions. Moreover, a positive correlation between water scarcity and nutrients was detected. Interestingly, the same trend was observed in data regarding the streams biodiversity and the microbiology, which have been studied in parallel samplings following the same experimental design.

¹ Université Clermont Auvergne, CNRS, Institut de Chimie de Clermont-Ferrand, F-63000, Clermont-Ferrand, France

² Department of Chemistry, Università di Torino, Via Pietro Giuria, 5 - 10125 Torino, Italy

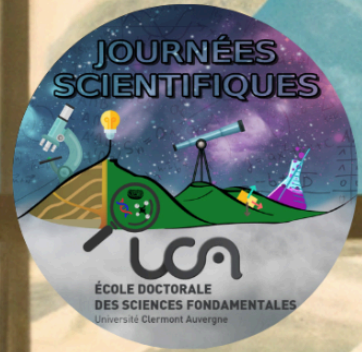
³ Department of Life Sciences and Systems Biology, University of Turin, Via Accademia Albertina 13, 10123 Turin, Italy

REFERENCES:

[1] Beniston, M. et al. (2014) 'Assessing the impacts of climatic change on mountain water resources'. *Sci Tot Env*, 493, p. 1129-1137. doi: 10.1016/j.scitotenv.2013.11.122.

[2] Castelar, S. et al. (2022), 'Wastewater treatment plant effluent inputs influence the temporal variability of nutrient uptake in an intermittent stream'. *Urban Ecosystems*, 25, p. 1313–1326. doi: 10.1007/s11252-022-01228-5.

SCIENTIFIC DAYS



10th & 11th
APRIL 2024
at 9.00 AM

Presentations and Posters
of current PhD theses

UCA
UNIVERSITÉ
Clermont
Auvergne

+ clermont
auvergne
métropole

AMPHITHÉÂTRE RECHERCHE
PÔLE PHYSIQUE
CAMPUS DES CEZEAUX

FULL PROGRAM
sf.ed.uca.fr

