

The background is a complex, abstract composition. It features large, organic, ruffled shapes in shades of brown, purple, and yellow, resembling microscopic structures or mineral formations. These are overlaid with sharp, geometric shapes, including a large white hexagon and various colored triangles and lines in purple, blue, and yellow. The overall effect is a vibrant, multi-layered visual field.

# Les groupements de recherche en chimie



**CHIMIE**

# Sommaire

|                                                                                                               |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Agents d'imagerie moléculaire (AIM)                                                                           | 6  |
| Alliages métalliques par/pour la fabrication additive (ALMA)                                                  | 8  |
| Batteries Redox Flow (REDOXFLOW)                                                                              | 10 |
| Big data en chimie (BIGDATACHIM)                                                                              | 12 |
| Bioingénierie des interfaces (B2i)                                                                            | 14 |
| Biomimétisme et bioinspiration (BIOMIM)                                                                       | 16 |
| Cavitation                                                                                                    | 18 |
| Chémobiologie (CHEMBIO)                                                                                       | 20 |
| Chiralité et multifonctionnalité (CHIRAFUN)                                                                   | 22 |
| Composites à matrice céramique : conception, modélisation, caractérisation (CMC) <sup>2</sup>                 | 24 |
| Conversion thermochimique de la biomasse et des déchets (THERMOBIO)                                           | 26 |
| Couplage mécanique oxydation diffusion (CONCORD)                                                              | 28 |
| Durabilité et matériaux biosourcés (DUMBIO)                                                                   | 30 |
| Hydrates de gaz (HYDRATES)                                                                                    | 32 |
| Métallurgie des alliages à haute entropie et concentrés complexes (HEA)                                       | 34 |
| Imagerie par spectrométrie de masse (MSI)                                                                     | 36 |
| Macrocycles pyrroliques (MAPYRO)                                                                              | 38 |
| Mécanismes et dynamiques de formation des assemblages protéiques auto-organisés (MÉDYNA)                      | 40 |
| Nanomatériaux manufacturés, toxicologie, écotoxicologie et risques : vers un développement maîtrisé (NAMASTE) | 42 |
| Nanostructures inorganiques par chimie en solution (NINO)                                                     | 44 |
| New Molecular Electronics (NEMO)                                                                              | 46 |
| Photo-électro stimulation (PES)                                                                               | 48 |
| Phosphore                                                                                                     | 50 |
| Plasmonique active                                                                                            | 52 |
| Problème quantique à N corps en chimie et physique (NBODY)                                                    | 54 |
| Procédés hydrométallurgiques pour la gestion intégrée des ressources primaires et secondaires (PROMÉTHÉE)     | 56 |
| Relations structures/propriétés électriques dans les polymères & composites (REEPOS)                          | 58 |
| Réseau des acteurs français de l'ALD (RAFALD)                                                                 | 60 |
| L'ARN en tant qu'outil et cible pour la chimie médicinale et la chémobiologie (RNA)                           | 62 |
| Solar Fuels Network - France (SFN FRANCE)                                                                     | 64 |
| Interaction non covalente de type Sigma-Hole (SIGMA-HOLE)                                                     | 66 |
| Solliciter la matière molle (SLAMM)                                                                           | 68 |
| Solvatation : avancées théoriques et expérimentales (SOLVATE)                                                 | 70 |
| Synthèse organique, inorganique et macromoléculaire en flux continu (SYNTH FLUX)                              | 72 |
| Théorie, modélisation et simulations atomistiques (THEMOSIA)                                                  | 74 |



© Cyril Fréillon, CNRS Images

Ce fascicule est consacré aux 35 Groupements de recherche (GDR) que CNRS Chimie pilote.

Les GDR sont des structures du CNRS, dans lesquelles différentes communautés scientifiques partagent leurs connaissances pour faire avancer un champ de recherche spécifique. Interdisciplinarité, rapprochements inattendus, approches multi-échelles font l'originalité et la force de ces réseaux thématiques. Leur capacité à mobiliser et à fédérer est un atout dans un espace de la recherche de plus en plus compétitif, avec des appels à projets nationaux et/ou européens exigeants. Ils préfigurent souvent les nouvelles orientations scientifiques, notamment les sujets investis par

les programmes d'équipements prioritaires et de recherche. Les GDR pèsent donc dans les choix stratégiques au plus haut niveau.

La constitution d'un GDR repose sur une réflexion entre chercheurs, qu'ils soient du CNRS, d'autres organismes comme l'INSERM, l'INRIA, l'INRAE, et enseignants-chercheurs, impliquant parfois des industriels. Ce consortium examine, à travers ses différents prismes, une problématique en termes de défis fondamentaux, d'applications ou de verrous à lever. L'analyse des motivations et des objectifs se fait ensuite en concertation avec CNRS Chimie qui fixe une feuille de route :

- définition d'une thématique précise qui saura regrouper et animer une communauté scientifique ;
- structuration des activités de recherche et coordination thématique ;
- veille scientifique et prospective permettant de suivre les évolutions du domaine en termes de résultats, de nouveaux défis scientifiques et d'enjeux de société ;
- formation des chercheurs adhérant à la thématique, notamment les jeunes chercheurs.

Concernant ce dernier point, les GDR sont particulièrement ouverts aux doctorants et post-doctorants qui peuvent profiter d'écoles thématiques sans équivalents pour se former dans le domaine du GDR.

Les GDR sont ainsi conçus pour devenir l'antichambre de la recherche du futur, à l'interface de sujets dont le croisement fait naître de nouvelles sous-disciplines.99

Sandrine Sagan  
Directrice de CNRS Chimie

# GDR AIM

## Agents d'imagerie moléculaire

250 chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de 50 laboratoires

### OBJECTIFS



Un cocktail de complexes d' $^{165}\text{Er(III)}$  et de  $\text{Gd(III)}$  permet la quantification du zinc en combinant l'imagerie TEMP et IRM.

© Bonnet et al. Chem. Comm. 2018, 54, 7597. with permission from The Royal Society of Chemistry

L'objectif du GDR AIM est de fédérer tous les groupes de recherche français développant des outils de chimie pour l'imagerie. Leurs compétences complémentaires permettront d'identifier et de lever les verrous et défis scientifiques pour aider au développement de sondes d'imagerie moléculaire et théranostiques pour des applications en imagerie optique, nucléaire et par résonance magnétique afin :

- de faciliter un diagnostic précoce, de caractériser la progression de la maladie, d'évaluer l'efficacité du traitement en clinique ;
- de mettre des outils d'investigation à la disposition de la recherche biomédicale. Le GDR AIM souhaite promouvoir une vision interdisciplinaire du développement des agents d'imagerie entre la chimie, la biologie et l'imagerie.



Images TEP de souris porteuses de tumeurs après injection de  $^{89}\text{Zr}$ -DFO-trastuzumab (a),  $^{89}\text{Zr}$ -DFOcyclo\*-trastuzumab (b) and  $^{89}\text{Zr}$ -DFO\*-trastuzumab (c). Les nouveaux chélateurs DFO\* empêchent l'accumulation dans les os.

© Franck Denat, ICMUB Dijon

### THÉMATIQUES

- Sondes optiques
- Sondes IRM
- Sondes nucléaires
- Ciblage
- Sondes nanoparticulaires
- Approches multimodales et théranostiques

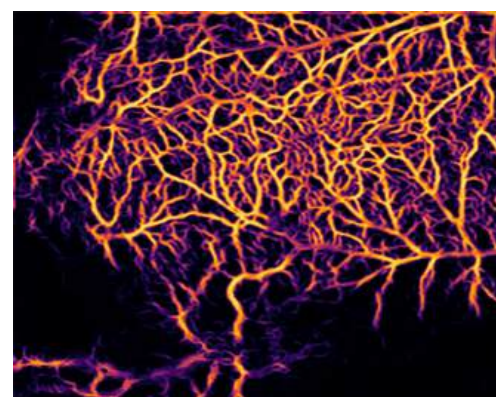


Image ventrale d'une souris après injection intraveineuse d'indocyanine green, avec détection dans la fenêtre proche-infrarouge (1500-1700 nm) et post-traitement d'image par l'intelligence artificielle.

© Xavier Le Guevel, IAB Grenoble

### PROSPECTIVES

L'imagerie moléculaire vise la détection *in vivo* ou *in vitro* des événements moléculaires. Les approches pour visualiser des molécules caractéristiques d'une pathologie représentent une avancée majeure pour le diagnostic clinique et un outil formidable pour la recherche. Grâce à l'imagerie moléculaire, la caractérisation et la visualisation, de façon non-invasive et répétitive, de l'expression de gènes, de fonctions, d'interactions et de voies de signalisation deviennent possibles chez des animaux modèles d'une pathologie ou chez des patients. Cette nouvelle génération d'agents d'imagerie permettra de détecter les processus moléculaires sous-jacents à une pathologie et donc de mieux la connaître.

Chaque procédure nécessite la conception d'un agent d'imagerie spécifique, ce qui place la chimie au centre de tout développement d'imagerie moléculaire.

L'imagerie multimodale permet de combiner les avantages de plusieurs techniques, par exemple, en associant les informations fonctionnelles aux informations morphologiques. Depuis quelques années, des approches théranostiques, combinant l'imagerie moléculaire et la thérapie, ont conduit à un changement de paradigme et au développement de la médecine personnalisée. Leur objectif est d'imager et de caractériser *in vivo* le profil moléculaire de la maladie, la livraison de médicaments sur le site d'intérêt, ainsi que leur efficacité pour une thérapie sur mesure. La théranostique est souvent associée à la nanomédecine car des nanoparticules peuvent être chargées de médicaments et d'agents d'imagerie assez facilement. En revanche, les agents théranostiques moléculaires peuvent être plus avantageux en termes de caractérisation et de contrôle de leurs propriétés physico-chimiques. Il s'agit clairement des domaines interdisciplinaires où les contributions de la chimie, la physique, la biologie, la médecine et la technologie en imagerie convergent vers des solutions révolutionnaires pour traiter les maladies.

Bien que la chimie pour l'imagerie soit au cœur de ce GDR, nos réflexions sont intégrées dans une approche pluridisciplinaire regroupant la biologie, la médecine et les technologies d'imagerie, car l'optimisation des radiotraçeurs, des sondes IRM ou optiques ne peut être menée que dans une concertation interdisciplinaire. Via ces interactions et en synergie avec des partenaires industriels, plus sélectifs et mieux adaptés pour que l'imagerie moléculaire puisse servir pleinement à la recherche biomédicale et à la médecine.

### CONTACTS

Directrice  
**Celia Bonnet (CBM, Orléans)**  
[celia.bonnet@cnrs.fr](mailto:celia.bonnet@cnrs.fr)

Directeur adjoint  
**Victor Goncalves (ICMUB, Dijon)**  
[victor.goncalves@u-bourgogne.fr](mailto:victor.goncalves@u-bourgogne.fr)

<http://gdraim.cnrs-orleans.fr>

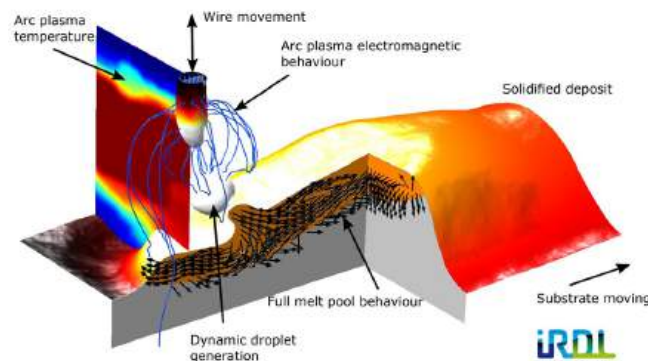
**GDR** Groupement  
de recherche  
**AIM** Agents d'imagerie moléculaire

# GDR ALMA

Alliages métalliques par/pour la fabrication additive

245 chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de 34 laboratoires

## OBJECTIFS

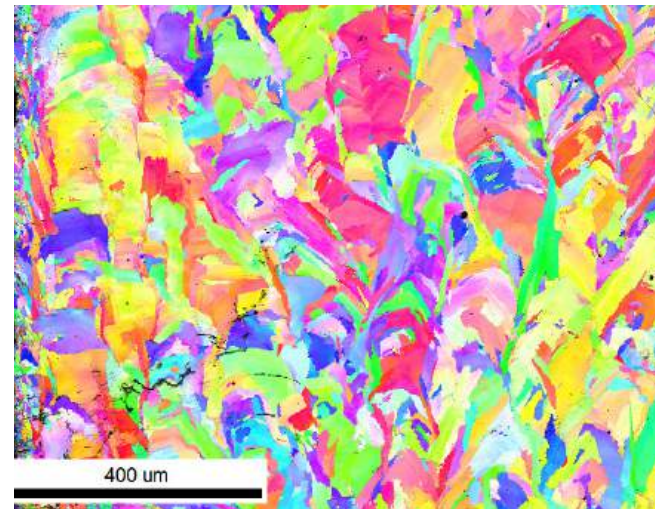


Modélisation multiphysique 3D du procédé WAAM.

© Muriel Carin, IRDL

L'ambition du GDR ALMA est de proposer une structuration des acteurs scientifiques français autour des problématiques fondamentales issues de la fabrication additive (FA) concernant les interactions entre la science des matériaux, la mécanique et l'ingénierie des procédés. Les principales missions du GDR sont les suivantes :

- faire émerger des projets novateurs et transversaux aux frontières des propriétés conventionnelles des alliages obtenus par voie classique/traditionnelle ;
- recenser et organiser les plateformes expérimentales en favorisant les recherches académiques amont ;
- former les jeunes chercheurs en science des matériaux, en mécanique et en ingénierie des procédés ;
- contribuer aux efforts de redynamisation et d'attractivité de la métallurgie et de ses métiers.

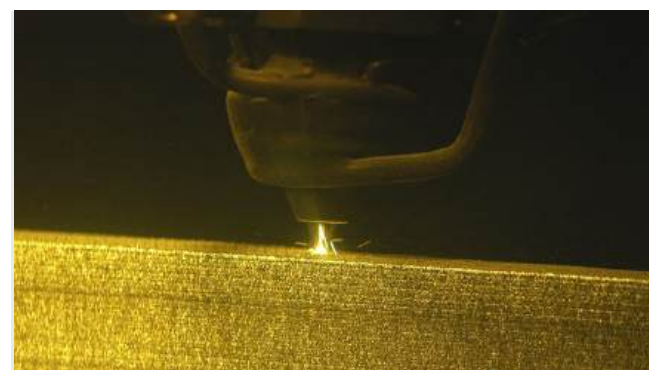


Microstructure EBSD d'un superalliage base Nickel brut de SLM.

© François Brisset de l'ICMMO, Orsay

## THÉMATIQUES

- Interactions énergie-matière
- Matériaux pour la FA
- Matériaux obtenus par FA
- Propriétés mécaniques
- Propriétés physico-chimiques
- Caractérisation/Modélisation/Formation



Fabrication d'une pièce 3D par le procédé de fusion laser de poudre projetée (LMD-DED).

© Thierry Malot, PIMM-AMValor, Paris

## PROSPECTIVES

La mission du GDR ALMA est de renforcer la structuration académique de la fabrication additive (FA) en France, en fédérant les acteurs nationaux d'une recherche à caractère amont sur des sujets ciblés sur des verrous scientifiques majeurs. Cette synergie, ces échanges et ces collaborations initiés au niveau national à travers les activités du GDR doivent à terme contribuer au positionnement et à la visibilité des équipes de recherche au niveau international. Les travaux du GDR sont centrés sur les propriétés des matériaux pour la fabrication additive et sur les propriétés des alliages obtenus par FA. Cette méthode de fabrication doit permettre d'imaginer une nouvelle métallurgie, basée sur le comportement des alliages hors équilibre et des alliages à gradient (composition, microstructure, propriétés).

Les travaux du GDR ALMA portent à la fois sur les mécanismes physiques élémentaires, les matériaux utilisés et les propriétés finales des pièces réalisées.

### MÉCANISMES PHYSIQUES

Dans les différents procédés concernés, on utilise une source de haute énergie (arc électrique, laser, faisceau d'électrons) pour fondre de la matière sous forme de poudre ou de fil, et structurer une pièce 3D par accumulation de couches fondues-solidifiées. Si la physique de ces procédés est suffisamment maîtrisée, beaucoup de domaines scientifiques restent mal appréhendés.

### MATÉRIAUX

Le GDR doit permettre de faire émerger des familles d'alliages identifiées pour leurs propriétés structurales ou fonctionnelles originales, suite à leur mise en forme par FA. De plus, la fabrication de poudres métalliques de qualités spécifiques (granulométrie définie avec faible dispersion, pureté des alliages, oxydation des poudres, coulabilité, étalabilité) reste un défi en raison de leur grande surface spécifique et de leur affinité pour l'oxygène.

### PROPRIÉTÉS

Une pièce obtenue par FA nécessite des spécificités en termes de tenue mécanique, traitements thermiques post-process et propriétés de surfaces. Beaucoup de propriétés restent cependant encore peu étudiées ou mal comprises : mécanismes de plasticité, rôle des défauts métallurgiques, propriétés des surfaces fonctionnelles, propriétés électriques, magnétiques, dégradation et usure.

Enfin, ce GDR et cette structuration permettront également :

- la mise en place d'études comparatives et de référentiels ;
- un recensement et une organisation des plateformes associées à la FA ;
- l'émergence de formations académiques, en particulier la mise en place d'écoles thématiques ;
- l'émergence de projets collaboratifs répondant à des appels à projets nationaux ou européens ;
- le soutien au développement de nouvelles machines à paramétrie assistée par la conception.

## CONTACTS

Directeur  
**Éric Hug (CRISMAT, Caen)**  
[eric.hug@ensicaen.fr](mailto:eric.hug@ensicaen.fr)

Directeur adjoint  
**Patrice Peyre (PIMM, Paris)**  
[patrice.peyre@ensam.eu](mailto:patrice.peyre@ensam.eu)

<https://alma.cnrs.fr>

**GDR** Groupement  
de recherche  
**ALMA** Alliages métalliques  
par/pour la fabrication additive

# GDR REDOXFLOW

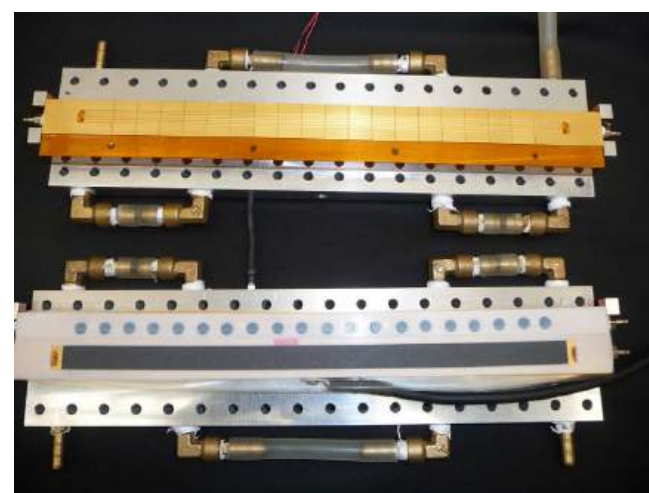
## Batteries Redox Flow

**100** chercheuses et chercheurs impliqués au sein de **20** laboratoires

## OBJECTIFS

Le GDR REDOXFLOW se donne pour but de rassembler une large communauté d'experts académiques et industriels pouvant coordonner leurs actions de recherche sur les batteries redox flow, de la recherche fondamentale aux problèmes liés à leur industrialisation. L'objectif est de créer des effets de synergie et d'émulation propres à favoriser de nouvelles solutions compétitives pour le stockage des énergies renouvelables.

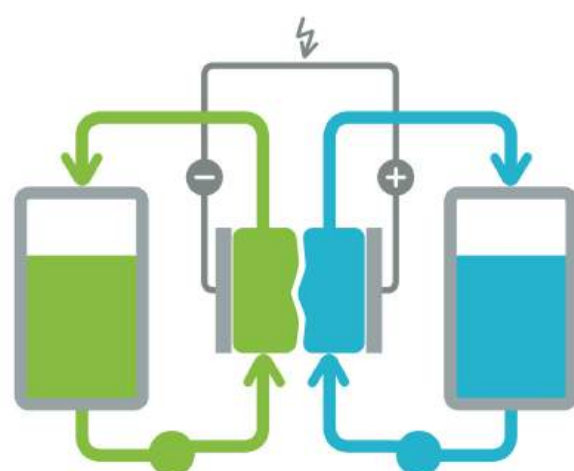
Le GDR a organisé en 2019 une première école thématique sur la technologie redox flow, et en 2020 un premier congrès européen sur les batteries redox flow, dans le but de le pérenniser et d'étendre à l'échelle européenne ce travail de structuration et d'analyse critique de ce domaine de recherche pour le stockage des énergies renouvelables.



Cellule segmentée développée au LEMTA.  
© Jérôme Dillet, LEMTA/INSIS/CNRS

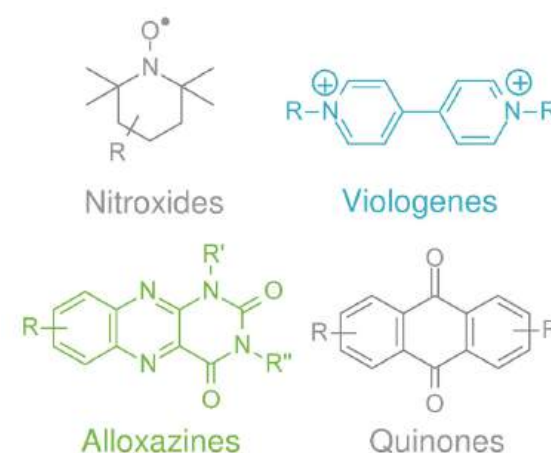
## THÉMATIQUES

- Nouveaux électrolytes solubles
- Redox targeting et suspensions
- Matériaux
- Système et modélisation
- Standardisation et applications



Représentation schématique d'une batterie redox flow.

© Christine Wetz



Familles de molécules organiques pour électrolytes.

© Mael Penhoat, MSAP/Université de Lille

## PROSPECTIVES

Les technologies redox flow sont étudiées depuis plus d'une cinquantaine d'années. Aujourd'hui, la batterie tout vanadium, technologie la plus mature, souffre encore d'un manque de compétitivité pour s'imposer dans le stockage des énergies renouvelables. Un défi majeur est le coût de l'électrolyte et de certains matériaux tels que la membrane échangeuse d'ions. Par ailleurs, les densités d'énergies et de puissance des systèmes redox flow restent modestes. La recherche doit être orientée vers la découverte et l'optimisation de nouveaux électrolytes à faible coût, de matériaux performants et compétitifs, et une meilleure compréhension et gestion de ces systèmes dans lesquels des flux de matière, d'électrons et de chaleur doivent être optimisés pour atteindre les meilleures performances et la plus grande durée de vie.

Plusieurs actions sont identifiées.

**SE CONFRONTER AUX DÉFIS POSÉS PAR LE DÉVELOPPEMENT DE NOUVEAUX ÉLECTROLYTES** pour batteries redox flow : la synthèse de nouvelles molécules, l'optimisation des procédés de synthèse pour diminuer le coût et l'impact environnemental, l'étude des propriétés électrochimiques, de la stabilité et de la formulation des électrolytes. Cela inclut les études théoriques et les développements méthodologiques permettant de mieux comprendre le comportement des molécules à des concentrations élevées.

**AUGMENTER LA DENSITÉ D'ÉNERGIE** grâce à des systèmes basés sur l'utilisation de suspensions ou de matériaux solides en interaction avec les électrolytes en flux. Deux technologies sont traitées :

- l'approche avec médiateurs électrochimiques (redox-targeting/solid boosters) comprend un électrolyte circulant liquide conjointement avec des matériaux d'insertion dans les réservoirs ;
- l'approche semi-solide pour laquelle une suspension solide électroactive est en suspension sous flux. Des aspects théoriques et technologiques sont également abordés ici.

**OPTIMISER LES MATÉRIAUX** pour dépasser les limites actuelles des batteries en termes d'efficacité, de densité de puissance et de coût. Cela inclut notamment les membranes polymériques ou séparateurs poreux, les matériaux d'électrode poreux, les plaques bipolaires, les joints ou les matériaux constitutifs d'un électrolyte solide. Cela comprend également des études sur la corrosion et le vieillissement des matériaux pendant le fonctionnement de la batterie.

**DIMENSIONNER ET OPTIMISER LA BATTERIE REDOX FLOW** comme système électrochimique par des approches d'ingénierie et modélisation. Cela implique l'optimisation des flux d'électrolyte dans le volume et dans le temps, la minimisation des courants de fuite, la diminution des différents phénomènes de résistance, les échanges de chaleur et l'optimisation du BMS (battery monitoring system).

**ÉVALUER LES INNOVATIONS DANS LE DOMAINE DES BATTERIES REDOX FLOW** en appliquant des tests standards pertinents qui feront consensus pour la communauté. Les applications envisagées doivent être définies en termes de service pour le réseau électrique en visant à définir les objectifs de coûts réalistes pour l'émergence de technologies redox flow sur un marché concurrentiel.

## CONTACTS

Directeur  
**Emmanuel Baudrin (LRCS, Amiens)**  
[emmanuel.baudrin@u-picardie.fr](mailto:emmanuel.baudrin@u-picardie.fr)

<https://gdr-redoxflow.cnrs.fr>

**GDR** Groupement de recherche  
**REDOXFLOW Batteries Redox Flow**

# GDR BIGDATAACHIM

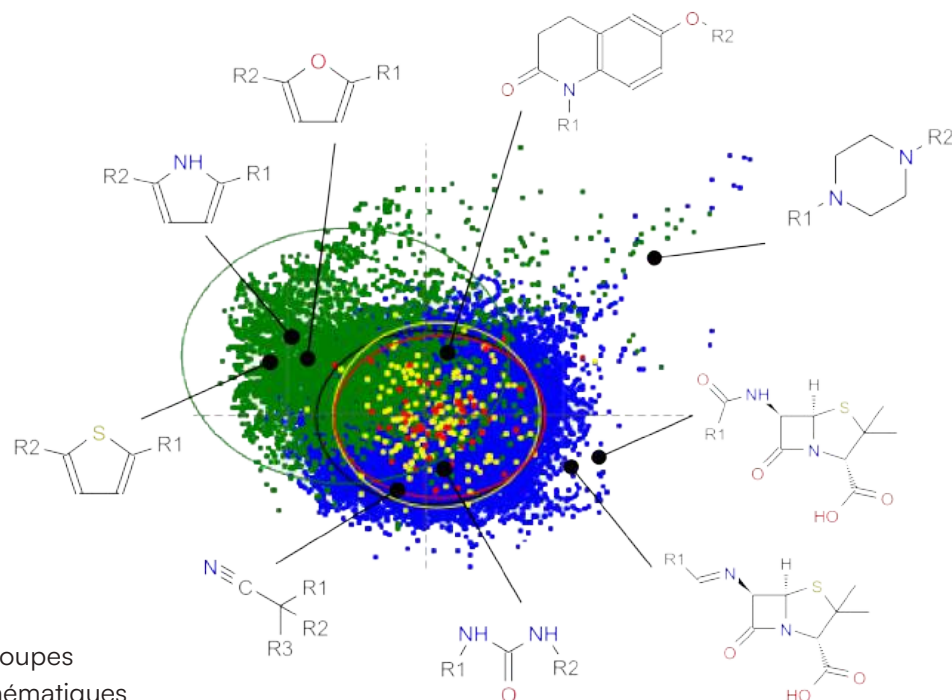
## Big data en chimie

**90** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **29** laboratoires

## OBJECTIFS

La mission du GDR BigDataChim est de promouvoir et d'animer des activités de recherche interdisciplinaires en chémoinformatique. L'objet d'étude est l'organisation et la recherche de l'information chimique ainsi que l'identification des relations entre structures chimiques et propriétés.

Ce GDR est composé de groupes de travail représentatifs de thématiques comme la chimie quantique, les simulations numériques, la réactivité chimique ou la conception rationnelle de molécules. Une forte composante de ce GDR s'attache aussi à étudier les interactions entre les molécules et le vivant.

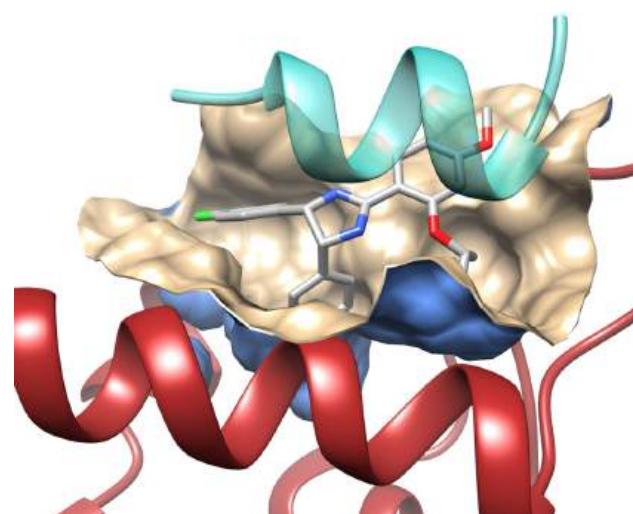


### Explorer l'espace chimique.

© Pascal Bonnet, ICOA/Université d'Orléans

## THÉMATIQUES

- Bases de données
- Développement de méthodes pour l'acquisition, le traitement et l'analyse des données afin de rationaliser, simuler et prédire les propriétés des molécules
- Modélisation et prédiction des activités biologiques

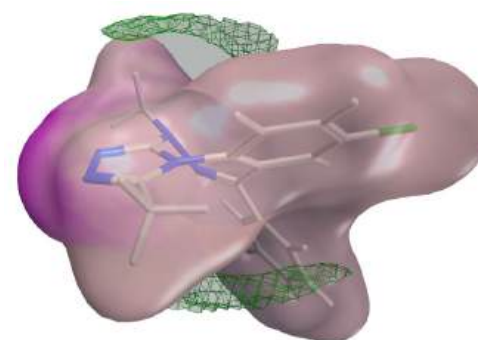


### Prédire les interactions moléculaires.

© Didier Rognan, LIT/CNRS Strasbourg

## PROSPECTIVES

Le Groupement de recherche BigDataChim a vocation à créer une dynamique favorable à l'utilisation des données massives en sciences chimiques. La chémoinformatique est au carrefour de multiples disciplines en chimie, informatique, statistiques, biologie, physique, avec la molécule comme dénominateur commun. L'organisation des données en sciences chimiques comme, par exemple, les "Chemical Abstracts", est apparue il y a maintenant plus d'un siècle, alors que les bases de données en biologie sont apparues au début des années 80. L'avènement des différentes techniques "omics" en biologie (génomique, protéomique, métabolomique) accélèrent la génération de mégadonnées, données massives que l'on appelle aussi "big data". Le terme "big data" est un terme récent qui recouvre différents aspects relatifs aux données en masse : la collecte, le stockage, le partage, la fouille, l'analyse, la prédiction et la visualisation. Les big data posent de nouveaux défis dans toutes ces composantes.



### Estimer les propriétés.

© Olivier Sperandio, LBS/Institut Pasteur, Paris

La chémoinformatique s'intéresse à des questions d'ordre fondamental telles que le développement de descripteurs moléculaires, de champs de force en mécanique moléculaire, de méthodes d'apprentissage machine ou d'outils de réalité virtuelle. Elle est aussi à l'origine de très nombreuses applications : conception rationnelle de nouveaux solvants "verts", de complexants et extractants des radionucléides,

élaboration de nouvelles molécules constitutives des arômes et des parfums ou, encore, prédictions de la réactivité chimique parmi lesquelles on retrouve le développement d'algorithmes performants dédiés à la rétrosynthèse et basés sur des méthodes d'apprentissage et d'intelligence artificielle. De nouvelles méthodes prédictives pour bio-profiler les composés chimiques sont également très attendues pour alerter sur des effets secondaires potentiels comme la toxicité et l'écotoxicité, mais aussi comme une alternative à l'utilisation d'animaux en laboratoire pour évaluer les risques chimiques des molécules.

Une caractéristique de la chémoinformatique, que ce soit pour les équipes françaises ou étrangères, est la petite taille de la majorité des équipes qui sont souvent une composante d'unités de recherche beaucoup plus importantes. Ce GDR permet de renforcer les efforts de recherche de ses participants par des actions telles que l'organisation de séminaires en association avec la Société Française de chémoinformatique (SFCi), la mise en place de formations de haut niveau (école d'été de chémoinformatique de Strasbourg), ou la mise en place d'hackathons dédiés à la conception et au partage de méthodes et d'outils innovants.

## CONTACTS

Directeur  
**Dragos Horvath (CMC, Strasbourg)**  
dhorvath@unistra.fr

Directeur adjoint  
**Olivier Sperandio (Institut Pasteur, Paris)**  
olivier.sperandio@pasteur.fr

<http://gdr-bigdatachim.cn.cnrs.fr/web/accueil>

**GDR** Groupement  
de recherche  
**BigDataChim** Big data en chimie

# GDR B2I

## Bioingénierie des interfaces

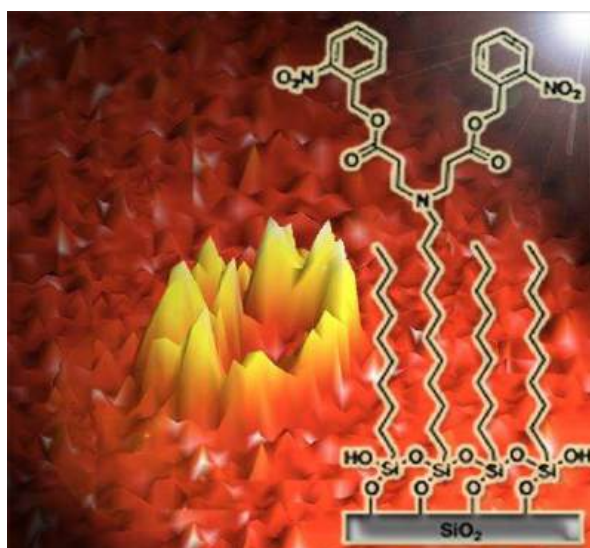
**200** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **50** laboratoires

### OBJECTIFS

La mission du GDR B2i est de fédérer la communauté française et francophone européenne autour d'une thématique pluridisciplinaire dont les activités de recherche portent sur les biointerfaces.

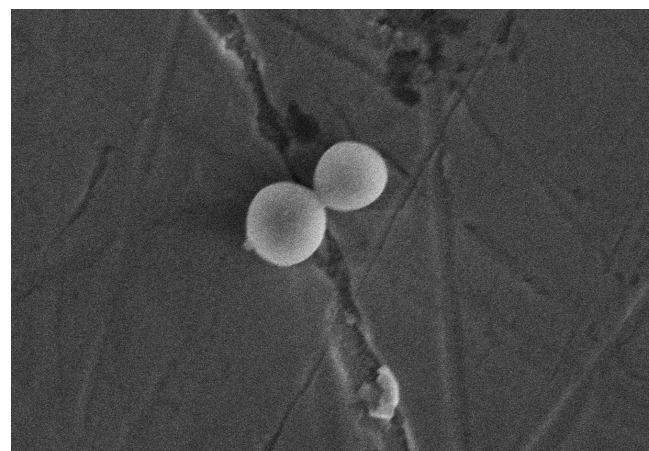
Le GDR B2i a pour vocation d'inciter les synergies entre les différentes disciplines afin de permettre l'émergence de projets innovants et transversaux. Face aux défis actuels de santé publique, les dispositifs médicaux (biomatériaux, dispositifs implantables), les biopuces, les *Lab-on-a-chip*, les biocapteurs et les nanomatériaux sont exploités dans un large éventail d'applications, qui vont du médical à l'analyse environnementale, en passant par le contrôle alimentaire (dosage des OGM, de mycotoxines, de pathogènes...).

La bioingénierie des interfaces vise donc à maîtriser les propriétés physico-chimiques et biochimiques aux interfaces des matériaux, de manière à en maîtriser la furtivité et la spécificité.



Élaboration de SAMs mixtes sur SiO<sub>2</sub>

© Luc Vellutini Karine Heuzé, ISM CNRS Bordeaux  
© 2013 American Chemical Society



*Staphylococcus aureus* (staphylocoque doré)  
@ surface de titane

© Vincent Humblot, Institut de recherche femto-st

### THÉMATIQUES

- Élaboration de biointerfaces complexes : fonctionnalisation, impression et nano-structuration
- Caractérisation des biointerfaces, opportunité et perspectives : vers la caractérisation *operando* et modélisation *in silico*
- Les biointerfaces au cœur des dispositifs médicaux
- Action transverse - un enjeu majeur : les interactions microorganisme/surface



Prothèse totale de hanche # titane.

© Grand Angle Santé 2018-2019

### PROSPECTIVES

L'analyse détaillée des compétences portées par l'ensemble des équipes du GDR B2i met très nettement en évidence la notion de multidisciplinarité, de complémentarité dans les approches et les problématiques étudiées, et de transversalité.

D'un point de vue scientifique, les actions du GDR B2i ont mis en avant de nouvelles directions, mais aussi de nouveaux besoins, tant en élaboration qu'en caractérisation des biointerfaces. Ainsi, les axes scientifiques ont vu leurs contours redessinés avec l'arrivée de nouveaux acteurs, mais également avec la création d'un nouvel axe transversal ciblant les interactions souhaitées ou néfastes entre les microorganismes et les interfaces.

De nouvelles voies de fonctionnalisation et d'élaboration d'interfaces complexes sont explorées avec l'apport d'architectures nanostructurées en 3 ou 4 dimensions, mais également avec des fonctionnalisations plus sélectives et multifonctionnelles. La caractérisation *in situ* et/ou *operando*, le couplage de techniques spectroscopiques et de microscopies et l'aspect modélisation *in silico* sont mis à profit. De nouvelles orientations tendent vers le secteur très ciblé du biomédical avec des applications dans le domaine des capteurs embarqués et des dispositifs/laboratoires miniaturisés ; on note également l'émergence de l'application au diagnostic et à la thérapie par l'utilisation de nanoparticules. Un enjeu majeur relié à l'interaction entre divers microorganismes et les surfaces est abordé. Ces interactions peuvent être néfastes, comme dans le cas de formation de biofilms, ou encore souhaitées dans le cadre de la détection de pathogènes ou l'utilisation de microorganismes dans le domaine de l'énergie.

Enfin le GDR B2i souhaite :

**ACCROÎTRE SON RAYONNEMENT EUROPÉEN** avec notamment l'intégration de laboratoires francophones européens apportant de nouvelles compétences, tant

en caractérisation, avec par exemple le laboratoire JRC d'Ispra en Italie, qu'en élaboration et application avec le CSEM de Neuchâtel en Suisse.

**ACCROÎTRE LES INTERACTIONS AVEC LES INDUSTRIELS ET LES END-USERS** avec la création d'un club des partenaires industriels, mais aussi avec l'intégration de laboratoires travaillant dans les domaines des Biomatériaux/Bioingénierie appliqués aux sciences de la vie, issus du CEA, INSERM, UGA.

**ACCROÎTRE SON RÉSEAU ET LA FORMATION DES JEUNES CHERCHEUR.S.E.S** en créant un club des doctorant.e.s et post-doctorant.e.s qui leur permettrait de prendre une part plus active dans la vie du GDR B2i, d'être moteur pour des actions nouvelles et pour la suite à donner à l'issue des deux mandats du GDR B2i. Ce club permettrait également de mettre en place un réseau pour le devenir des jeunes diplômés et leur intégration dans le monde de la recherche aussi bien académique qu'industrielle.

### CONTACTS

Directeur  
**Vincent Humblot (FEMTO, Besançon)**  
[vincent.humblot@femto-st.fr](mailto:vincent.humblot@femto-st.fr)

Directeurs adjoints  
**Yoann Roupioz (SyMMES, Grenoble)**  
[yoann.roupioz@cea.fr](mailto:yoann.roupioz@cea.fr)

**Luc Vellutini (ISM, Bordeaux)**  
[luc.vellutini@u-bordeaux.fr](mailto:luc.vellutini@u-bordeaux.fr)

[https://events.femto-st.fr/GdR\\_B2i/fr](https://events.femto-st.fr/GdR_B2i/fr)

**GDR** Groupement  
de recherche  
**B2I Bioingénierie des interfaces**

# GDR BIOMIM

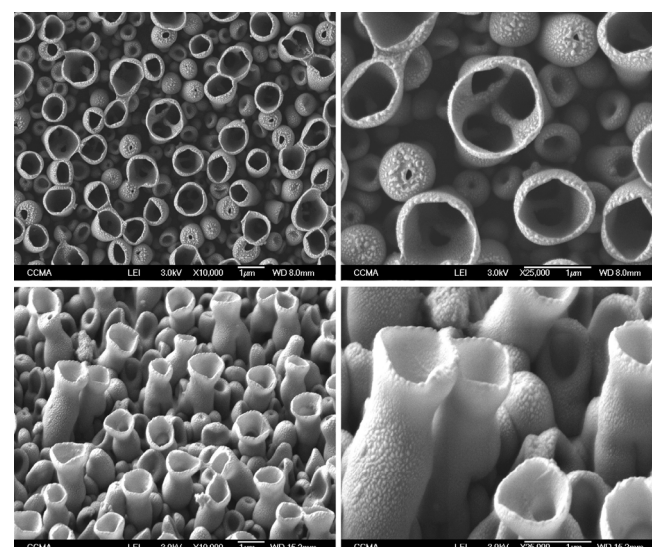
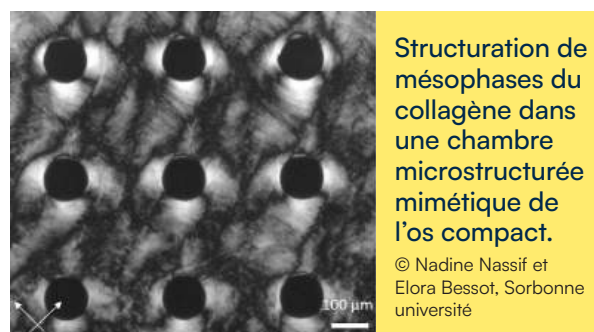
## Biomimétisme et bioinspiration

**699** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **92** laboratoires

## OBJECTIFS

Le GDR BIOMIM a été créé pour fédérer l'ensemble des acteurs français travaillant dans le domaine du biomimétisme et de la bioinspiration. Il rassemble 92 équipes de recherche et laboratoires, avec plus de 600 chercheurs et doctorants, venus de toute la France et aux formations et spécialisations scientifiques diverses pour relever les défis scientifiques et

sociétaux à travers des solutions inspirées de la nature. Il vise également à créer et valoriser une cartographie sur les activités de recherches et initiatives françaises et en assurer la promotion et le rayonnement à l'international, devenir un appui en innovation pour les directions scientifiques, les organismes publics, les ressources déployées.



## THÉMATIQUES

- Sentir, ressentir, percevoir
- Processus de transformation biomimétique
- Déplacement, mouvement
- Structure
- Catalyseur, processus catalytique, énergie et stockage
- Matériaux bioinspirés
- Biomatériaux

## PROSPECTIVES

### SENTIR, RESENTIR, PERCEVOIR

Les biocapteurs et les laboratoires sur puce présentent un grand potentiel pour les nouvelles technologies, en particulier pour la santé. La conception et l'utilisation de nouveaux matériaux ou systèmes de détection basés sur des approches biomimétiques et/ou bio-inspirées permettent d'améliorer considérablement leurs performances.

### PROCESSUS DE TRANSFORMATION BIOMIMÉTIQUE

Les processus de transformations chimiques dans la nature ont été optimisés et perfectionnés en termes d'énergie et d'efficacité selon le contexte. Cela combine la compréhension approfondie des mécanismes de ces transformations dans les différentes échelles (moléculaire, cellulaire, écosystème complexe) et la reproduction/l'ingénierie de ces procédés chimiques.

### DÉPLACEMENT, MOUVEMENT

L'ambition de cet axe est d'organiser un réseau de laboratoires impliqués dans l'étude du déplacement et du mouvement. Les recherches s'intéressent à la compréhension de mécanismes qui permettent de fuir et de se dissimuler ou de poursuivre et attraper, enfin de se déplacer seul ou en groupe parfaitement coordonné. Ils inspirent des modélisations et prototypes de capteurs, d'actionneurs, de systèmes poly-articulés et de robots "durs ou mous".

### STRUCTURE

Les problèmes scientifiques interdisciplinaires seront abordés par l'analyse structurelle des systèmes biomimétiques organisés, des topologies et des tissus d'ordre hiérarchique, des membranes lipidiques organisées en structures connexes et des surfaces nanoporeuses accordables de nature superhydrophobe. Des nanostructures multi-compartimentées sensibles à des stimuli biologiques, chimiques et/ou physiques seront inspirées des organelles et autres édifices de compartimentation cellulaire et élaborées par assemblage spontané de (bio)molécules.

### CATALYSEUR, PROCESSUS CATALYTIQUE, ÉNERGIE ET STOCKAGE

Cet axe se concentre principalement sur les catalyseurs, les processus catalytiques tels que les protéines enzymatiques et les sources d'énergie bioinspirées telles que la photosynthèse et le stockage d'énergie tel que les biopiles.

### MATÉRIAUX BIOINSPIRÉS

L'enjeu central est de déchiffrer les structures et mécanismes d'élaboration biologiques afin d'en reproduire au mieux les principales caractéristiques. Des approches multidisciplinaires permettent ainsi le développement d'objets biomimétiques depuis l'échelle moléculaire jusqu'aux surfaces et matériaux tridimensionnels. Le champ des applications concerne les biomatériaux, les récepteurs synthétiques, les senseurs, la catalyse.

### BIOMATÉRIAUX

Cet axe se concentre sur les biofilms, les antibactériens, les biocontaminants, l'ingénierie tissulaire, les capteurs bioinspirés, la bio-impression 3D, les médicaments et les matériaux bioinspirés à valeur thérapeutique.

### CONTACTS

Directeur  
**Frédéric Guittard (Nice Lab, Nice)**  
[Frederic.GUITTARD@univ-cotedazur.fr](mailto:Frederic.GUITTARD@univ-cotedazur.fr)

Directeur adjoint  
**Damien Chablat (LS2N, Nantes)**  
[damien.chablat@univ-nantes.fr](mailto:damien.chablat@univ-nantes.fr)

<https://www.gdr-biomim.com>

**GDR** Groupement  
de recherche  
**BIOMIM** Biomimétisme  
et bioinspiration

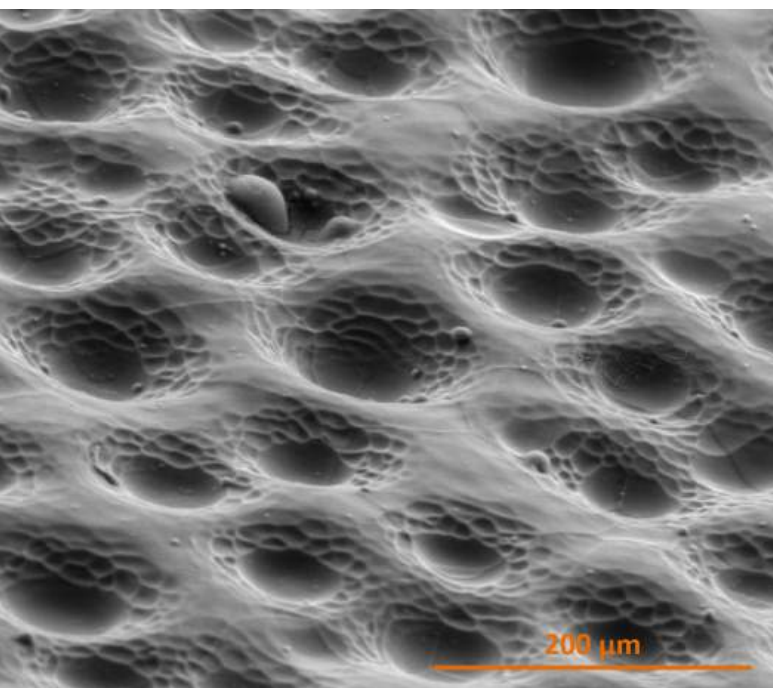
# GDR CAVITATION

**120** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **33** laboratoires

## OBJECTIFS

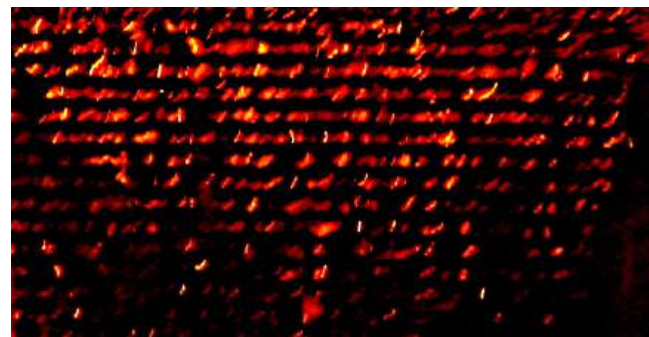
Les missions principales du GDR CAVITATION sont :

- favoriser l'avancée des connaissances des mécanismes réactionnels chimiques et physico-chimiques sous l'effet de la cavitation acoustique ou hydrodynamique ;
- élargir les applications potentielles de la sonochimie ;
- renforcer l'interaction entre les équipes membres du GDR ;
- augmenter la visibilité de la communauté sonochimique française à l'échelle internationale.



Surface de magnésium après traitement ultrasonore.

© Sergueï Nikitenko, ICSM © 2018 Elsevier

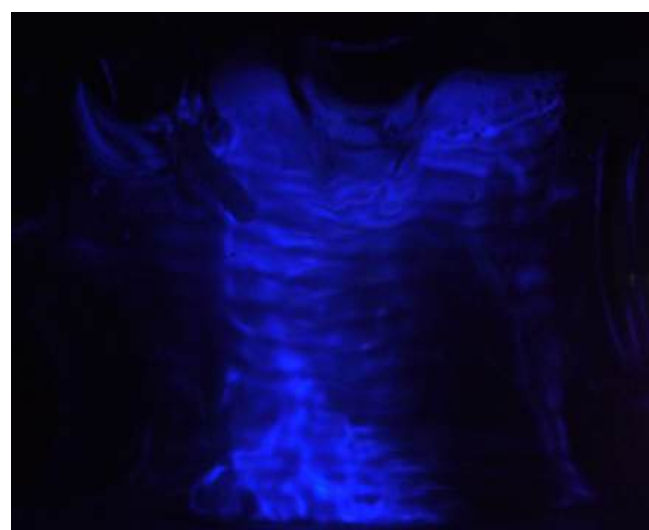


Bulles de cavitation dans une onde stationnaire à 500 kHz.

© Loïc Hallez, UTINAM Besançon

## THÉMATIQUES

- Cavitation : théorie et aspects fondamentaux
- Traitement sonochimique des effluents
- Matériaux et réactivité
- Valorisation de produits naturels
- Applications médicales
- Métrologie, moyens de mesure et de caractérisation de réacteurs



Sonochimiluminescence.

© Sergueï Nikitenko, ICSM  
© 2018 Elsevier

## PROSPECTIVES

Les ultrasons de puissance sont utilisés dans de nombreuses applications, telles que l'homogénéisation, la désintégration, le dégazage, le nettoyage, les procédés agroalimentaires ou le traitement médical. De même, la cavitation acoustique produite par les ondes ultrasonores apporte de nouvelles solutions dans le domaine de la chimie. Elle améliore la sélectivité et les rendements ainsi que la qualité des produits synthétisés. Les effets chimiques des ultrasons dans les milieux liquides reposent sur le phénomène de cavitation : nucléation, croissance et implosion de microbulles formées lorsqu'un liquide est soumis à une onde ultrasonore. Cette implosion violente génère des conditions extrêmes à l'intérieur des bulles qui donnent naissance à des espèces chimiquement actives sans ajout de réactifs dans le milieu. C'est pourquoi la sonochimie est considérée comme une discipline pouvant contribuer au développement de la chimie verte.

Le GDR CAVITATION réunit les compétences des spécialistes travaillant dans les différents domaines liés à l'application du phénomène de cavitation. Il définit les priorités pour l'activité scientifique dans six directions :

- la sonochimie fondamentale (sonoluminescence, dynamique des bulles, spectroscopie acoustique, modélisation) ;
- le traitement sonochimique des effluents ;
- la sonochimie des matériaux (synthèse et réactivité) ;
- la valorisation de produits naturels en utilisant le phénomène de cavitation ;
- les applications médicales de cavitation ;
- les moyens de caractérisation des réacteurs ultrasonores.

Le périmètre scientifique du GDR a été défini pour favoriser les échanges transdisciplinaires ; renforcer les liens entre les équipes scientifiques et industrielles à l'échelle nationale ; soutenir les projets scientifiques des jeunes chercheurs ; promouvoir l'émergence de projets de recherche à l'échelle nationale et internationale.

La sonochimie est une science émergente qui se développe assez rapidement dans le monde. Actuellement, la communauté scientifique mondiale des sonochimistes est structurée par deux sociétés internationales : "European Society of Sonochemistry (ESS)" et "Asia — Oceania Sonochemical Society (AOSS)". La communauté sonochimique française est déjà fortement présente dans ces deux sociétés. L'objectif du GDR CAVITATION est de donner encore plus de visibilité internationale à la recherche dans le domaine de la cavitation en France grâce à l'organisation de réunions et au soutien des échanges scientifiques internationaux.

## CONTACTS

Directeur  
**Tony Chave (ICSM, Marcoule)**  
[tony.chave@cea.fr](mailto:tony.chave@cea.fr)

Directeur adjoint  
**Jean-Yves Hihn (UTINAM, Besançon)**  
[jean-yves.hihn@univ-fcomte.fr](mailto:jean-yves.hihn@univ-fcomte.fr)

<http://gdr-cavitation.cnrs.fr>

**GDR** Groupement  
de recherche  
**CAVITATION**

# GDR CHEMBIO

## Chémobiologie

**611** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **83** laboratoires

## OBJECTIFS

La chémobiologie vise à concevoir et élaborer des outils moléculaires susceptibles de sonder ou moduler un processus biologique d'intérêt, afin d'en appréhender le fonctionnement, et parfois de le corriger, ainsi qu'à observer et analyser ces outils qui vont réagir ou interagir dans un environnement biologique complexe. La chémobiologie trouve des développements naturels dans des domaines tels que la santé ou l'environnement, et va se retrouver en interaction forte avec des branches telles que la conception de stratégies thérapeutiques et de diagnostic ou encore l'agrochimie et l'écologie.

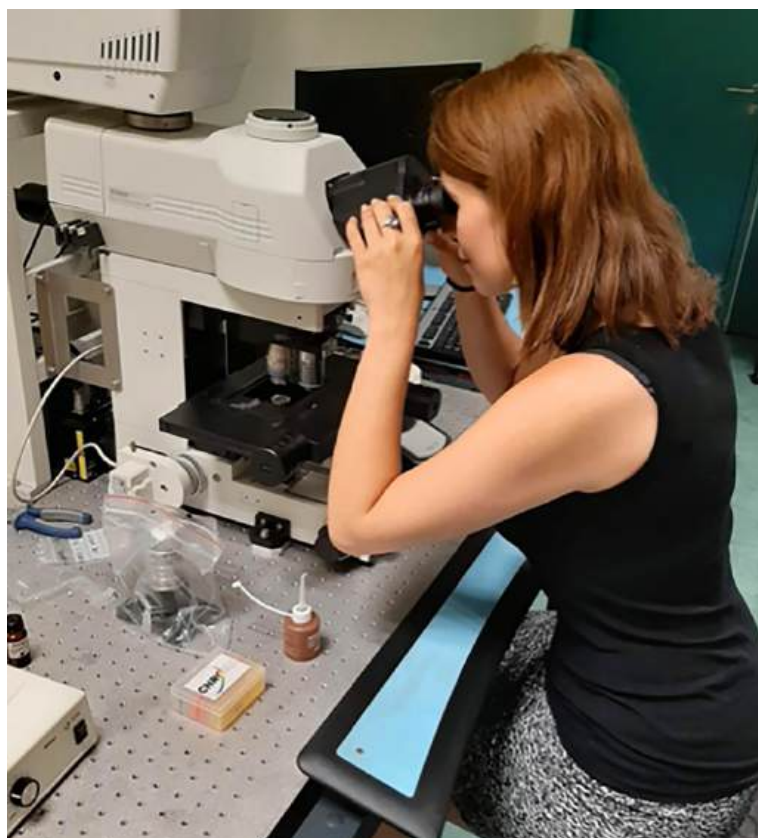
En constituant un lieu d'échange des expertises et de recherche de compétences aussi bien par les chimistes que par les biologistes, le GDR ChemBio permet de stimuler de nouvelles questions.



Synthèse de sonde fluorescente  
©GDR ChemBio



Chimie  
in vivo  
©GDR  
ChemBio



Dialogue avec les cellules  
©GDR ChemBio

## THÉMATIQUES

- Ciblage et modulation chimiques, compréhension de fonctions biologiques
- Outils chimiques et approches moléculaires
- Technologies physico-chimiques d'investigation et de quantification

## PROSPECTIVES

### STRUCTURER LA RECHERCHE EN CHEMOBIOLOGIE

La mission première du GDR ChemBio est de fédérer les équipes françaises travaillant en chémobiologie, équipes dispersées sur le territoire national.

Participer au GDR est un moyen de rassembler ces chercheurs, d'échanger et de créer une nouvelle dynamique de recherche en France. Le GDR ChemBio est une structure de coordination autour de cette thématique. Le GDR permet d'être plus compétitif au niveau international et amplifie la visibilité de la recherche française dans ce champ thématique à l'international, permettant de lui donner une place plus importante en France comme c'est le cas depuis plusieurs années dans d'autres pays.

### ÉCHANGER

Le GDR ChemBio organise des rencontres chaque année sur un site différent sur un format de 2-3 jours. Les échanges se font par le biais des plateformes intégrées dans le GDR ChemBio. Ces plateformes constituent des lieux d'utilisation et de preuve de concept des outils développés et réciproquement les plateformes montent en compétences grâce aux outils développés.

### FAVORISER LES PROJETS COLLABORATIFS

L'une des forces du GDR ChemBio réside dans la richesse des domaines d'expertise des équipes et leur complémentarité, ce qui contribue à la création de collaborations et de projets internationaux.

### PARTICIPER À LA FORMATION DES ÉTUDIANTS

Le GDR ChemBio vient en soutien de l'organisation d'écoles thématiques et de formations sur site avec l'aide des plateformes.

Des tables rondes thématiques autour des pratiques d'enseignement permettent d'échanger et d'identifier des pistes de perfectionnement des formations afin de préparer au mieux la future génération à aborder ces problématiques.

### VALORISER - TRANSFÉRER LES TECHNOLOGIES

Le GDR ChemBio permet de sensibiliser la communauté et les jeunes en formation à la question de la valorisation. Des chercheurs ayant développé des start-up ou entreprises interviennent sur ces aspects. Les cellules de valorisation contribuent à la présentation des dispositifs de soutien constituant un lieu d'échange entre ces cellules et les chercheurs.

### OUVRIR VERS LES ARTS ET LES SCIENCES

Le GDR ChemBio a pour but de stimuler la créativité résultant de la rencontre entre artistes et chercheurs du GDR avec l'ambition d'encourager des méthodes innovantes de progression de la connaissance et de transfert des savoirs vers la société. Ce nouvel environnement est à même de permettre l'exploration de nouveaux modes d'expression de la chémobiologie et d'en éprouver la réception par un public extra-scientifique pour une médiatisation différente des pratiques actuelles.

## CONTACTS

Directeur  
**Christophe Biot (UGSF, Lille)**  
[christophe.biot@univ-lille.fr](mailto:christophe.biot@univ-lille.fr)

Directeurs adjoints  
**Dominique Guianvarc'h (ICMMO, Paris Saclay)**  
[dominique.guianvarch@universite-paris-saclay.fr](mailto:dominique.guianvarch@universite-paris-saclay.fr)

**Boris Vauzeilles (ICSN, Paris Saclay)**  
[boris.vauzeilles@cnrs.fr](mailto:boris.vauzeilles@cnrs.fr)

[www.gdr.chemobiologie.cnrs.fr/](http://www.gdr.chemobiologie.cnrs.fr/)

**GDR** Groupement  
de recherche  
**ChemBio** Chémobiologie

# GDR CHIRAFUN

## Chiralité et multifonctionnalité

**108** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **29** laboratoires

## OBJECTIFS

Les objectifs du GDR CHIRAFUN sont :

- l'utilisation de la chiralité à la fois comme élément de structuration et comme apport de nouvelles propriétés pour concevoir une grande diversité de systèmes innovants dans des domaines variés (matériaux chiraux émissifs, conducteurs, magnétiques, biomimétiques, polymères, nanoparticules...) ;
- l'examen des propriétés chiroptiques des systèmes chiraux simples ou élaborés.

L'objectif est d'établir des nouvelles connaissances en chimie, physico-chimie et en physique fondamentale, mais également de développer des techniques d'analyses expérimentales et théoriques de pointe.

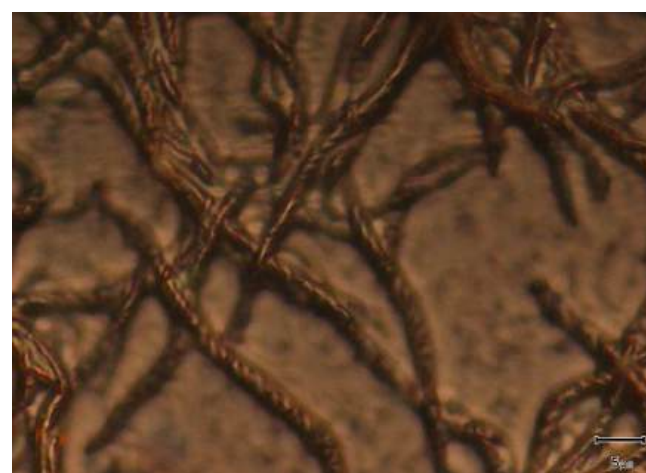
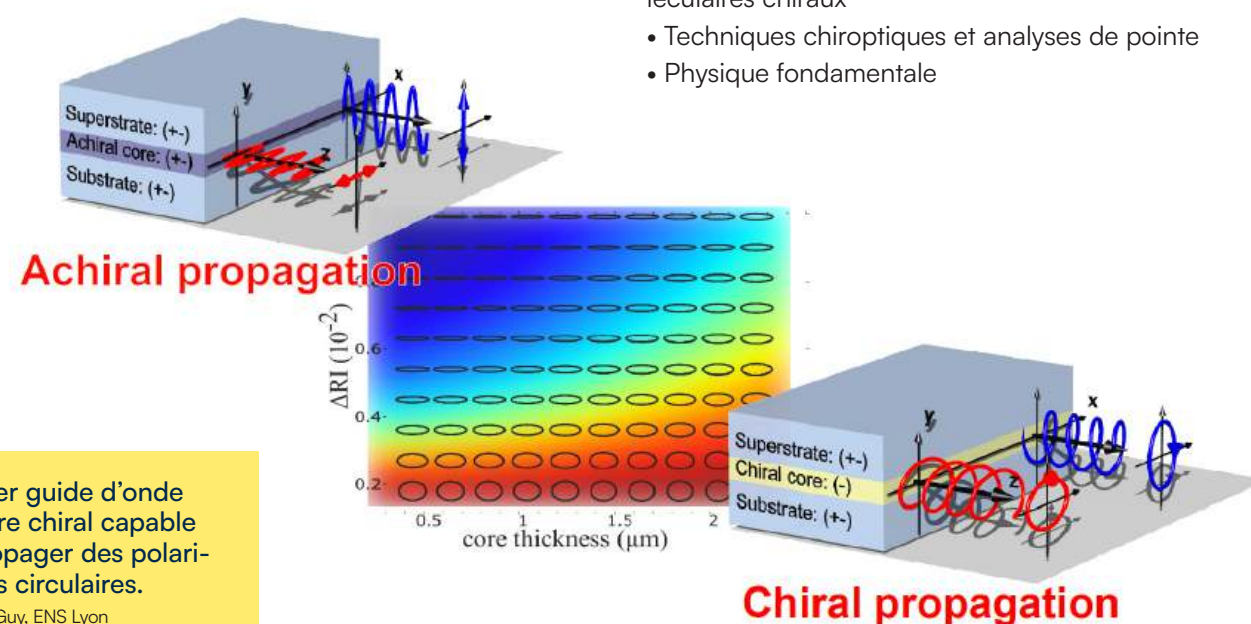


Image par microscopie optique de fibres supra-moléculaires homochirales électroactives d'un composé tris(TTF).

© Narcis Avarvari, MOLTECH Anjou

## THÉMATIQUES

- Science des matériaux moléculaires chiraux
- Systèmes biomimétiques et assemblages supramoléculaires chiraux
- Techniques chiroptiques et analyses de pointe
- Physique fondamentale



Premier guide d'onde planaire chiral capable de propager des polarisations circulaires.

© Laure Guy, ENS Lyon

## PROSPECTIVES

La chiralité (propriété qu'ont certains objets tridimensionnels de ne pas être identiques à leur image spéculaire) constitue une propriété inhérente de la matière. Cette asymétrie gauche-droite est présente partout, des particules élémentaires aux molécules du monde vivant. Elle est essentielle au fonctionnement et à la croissance des systèmes vivants, et détermine les propriétés des molécules bioactives, qu'elles soient de synthèse ou naturelles (principes actifs, substances odorantes...). La chiralité est une signature de la vie sur terre, mais pas uniquement. Elle a également des implications fortes en physique et en chimie. Ses principaux fondements sont bien établis dans divers domaines. Cependant, de nombreuses découvertes restent à faire.

Récemment, des avancées importantes ont été observées en science des matériaux moléculaires chiraux ; un domaine scientifique émerge en opto-électronique, grâce à l'implication de la chiralité dans les interactions lumière-matière, charges-matière et champ magnétique-matière. L'intérêt grandissant des chimistes pour une grande variété de matériaux moléculaires multifonctionnels (polymères, systèmes optiques linéaires et non linéaires, systèmes électroactifs, matériaux émissifs, conducteurs, magnétiques, nanoparticules...) permet d'envisager un apport significatif de l'étude de l'implication de la chiralité dans le but de concevoir de nouveaux matériaux dits "intelligents".

La chiralité se trouve au cœur des systèmes biomimétiques et assemblages supramoléculaires chiraux, de leur auto-organisation, des processus de reconnaissance et des fonctions actives qui en découlent.

L'étude de ces nouveaux systèmes chiraux nécessite le développement de techniques de séparation et d'analyse de pointe comme les techniques chromatographiques ou les techniques spectroscopiques. Ainsi, les techniques chiroptiques (dichroïsme circulaire, luminescence polarisée circulairement, activité optique Raman) et les spectroscopies résolues en temps se trouvent intimement liées au développement des systèmes chiraux.

La chiralité se place également au centre de domaines de recherche de physique fondamentale : l'origine de la vie, les effets de violation de parité, le magnétisme et la sélectivité de spin dans les systèmes chiraux.

Le pont entre les différents thèmes sera un moyen efficace d'entretenir et de développer une culture et un langage communs aux chimistes expérimentateurs, physico-chimistes, physiciens et théoriciens. Il ressort de ce projet de GDR CHIRAFUN un caractère pluridisciplinaire tout à fait unique.

## CONTACTS

Directrice  
**Jeanne Crassous (ISCR, Rennes)**  
[jeanne.crassous@univ-rennes1.fr](mailto:jeanne.crassous@univ-rennes1.fr)

Directeur et directrice adjoints  
**Narcis Avarvari (MOLTECH-Anjou, Angers)**  
[narcis.avarvari@univ-angers.fr](mailto:narcis.avarvari@univ-angers.fr)

**Laure Guy (LCH, Lyon)**  
[laure.guy@ens-lyon.fr](mailto:laure.guy@ens-lyon.fr)

<https://chirafun.sciencesconf.org>

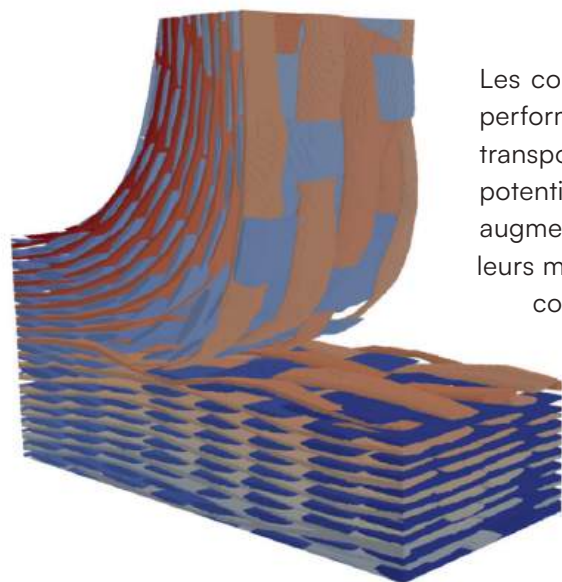
**GDR** Groupement  
de recherche  
**CHIRAFUN** Chiralité  
et multifonctionnalité

# GDR (CMC)<sup>2</sup>

## Composites à matrice céramique : conception, modélisation, caractérisation

**165** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **24** laboratoires

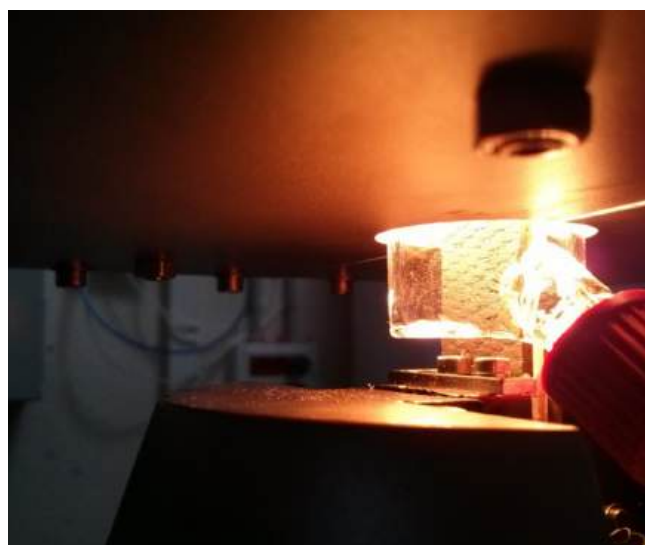
### OBJECTIFS



Les composites à matrice céramique sont des matériaux à très hautes performances destinés à des usages sous hautes températures : énergie, transports, espace... Ces matériaux, encore trop peu connus, ont un fort potentiel de conquête de nouveaux marchés ; or ceci n'est possible qu'en augmentant leur connaissance. Le GDR (CMC)<sup>2</sup> se consacre à l'étude de leurs méthodes de fabrication, de leur structure à toute échelle et de leur comportement mécanique, thermique et chimique, ainsi qu'aux modélisations associées. La recherche de nouvelles applications, de nouvelles formulations et la progression des connaissances sur leur comportement sont au cœur de l'activité du GDR, qui bénéficie d'un très fort appui de la part d'industriels déjà acteurs dans ce domaine ou en passe de l'être.

Segmentation d'un pied d'aube en CMC pour calcul mécanique.

© Jean Bénézech et Guillaume Couégnat, LCTS Bordeaux



Test mécanique sur CMC à 800°C sous gaz oxydants.

© Gérard L. Vignoles, LCTS Bordeaux

### THÉMATIQUES

Vers des CMC innovants, moins chers et plus rapides à produire :

- physico-chimie des procédés
- modélisation des procédés
- procédés originaux
- matériaux nouveaux

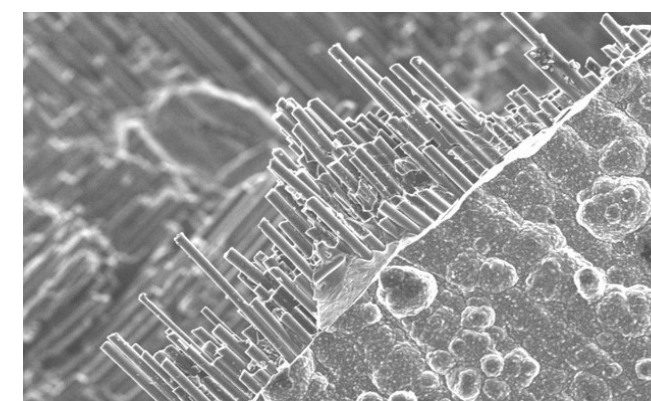
Vers des CMC davantage certifiés et intégrés :

- caractérisation structurale
- tests mécaniques, thermiques, environnementaux
- conception/modélisation

### PROSPECTIVES

Le premier volet des recherches touche le domaine de la fabrication des CMC au sens large et inclut plusieurs directions générales :

- accéder à une meilleure connaissance de la physico-chimie des procédés de fabrication ;
  - disposer de modélisations pertinentes des procédés afin d'en optimiser les paramètres ;
  - mettre en œuvre des procédés originaux, à la fois pour réduire les coûts des matériaux existants et pour fabriquer des matériaux nouveaux ;
  - enfin, concevoir des matériaux nouveaux en recherchant l'originalité sur le plan chimique ou des procédés.
- Le potentiel d'industrialisation du procédé doit donc être considéré très tôt dans la démarche From Lab to Fab.



Faciès de rupture d'un composite SiC/SiC.

© Pascal Reynaud, INSA Lyon

Le deuxième grand volet de l'activité de recherche traite de la connaissance de la structure et du comportement des CMC, avec pour corollaire la production de modèles permettant l'optimisation, le design et l'acquisition de savoirs sur l'intégration de pièces en CMC dans des systèmes. Les directions importantes sont :

- une connaissance renforcée de la structure multi-échelle des CMC grâce à de nombreuses techniques de caractérisation ;
- une meilleure connaissance du comportement de ces

CMC sous sollicitations diverses en milieux agressifs, grâce à des tests mécaniques, thermiques et environnementaux ;

- des modèles performants pour décrire le comportement des CMC, afin de rationaliser la conception de pièces les utilisant ;
- une meilleure intégration des pièces CMC dans les systèmes par le biais de joints et d'assemblages.

Le travail se structure en ateliers, groupes de travail, journées scientifiques et actions pédagogiques. Le GDR a pour vocation de faciliter les échanges, non seulement entre unités de recherche, mais aussi avec l'industrie. En effet, il y a un fort besoin d'innovation et de renforcement des connaissances formulé par les agences nationales et les entreprises qui utilisent ou peuvent utiliser les CMC dans leurs applications, dont certaines sont stratégiques, et qui apportent donc un soutien important à ce GDR. De plus, la communauté française des CMC peut renforcer sa visibilité internationale grâce au GDR, en particulier vers les autres pays leaders du domaine (Allemagne, Italie, Grande-Bretagne, USA, Japon, Chine...).

### CONTACTS

Directeur  
**Gerard L. Vignoles (LCTS, Bordeaux)**  
[vinhola@lcts.u-bordeaux.fr](mailto:vinhola@lcts.u-bordeaux.fr)

Directeur adjoint  
**Pascal Reynaud (MATEIS, Lyon)**  
[pascal.reynaud@insa-lyon.fr](mailto:pascal.reynaud@insa-lyon.fr)

<http://www.gdr-cmc2.cnrs.fr>

**GDR** Groupement  
de recherche  
**(CMC)<sup>2</sup> Composites à matrice  
céramique : conception,  
modélisation, caractérisation**

# GDR THERMOBIO

## Conversion thermochimique de la biomasse et des déchets

90 chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de 35 laboratoires

### OBJECTIFS

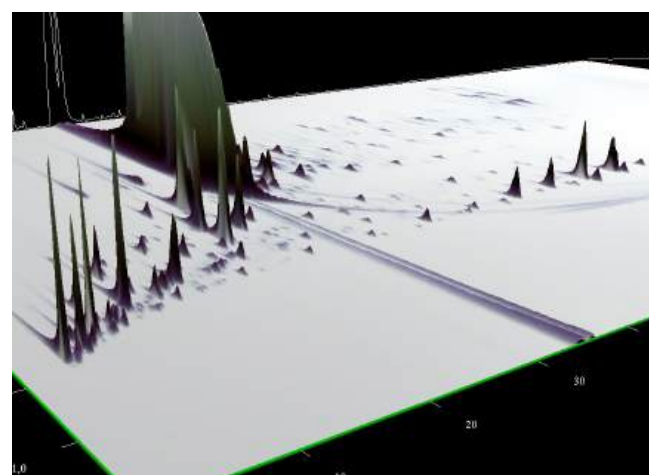
La mission principale du GDR THERMOBIO est de favoriser l'échange de connaissances dans le domaine de la valorisation de la biomasse par des procédés thermochimiques et de fédérer les chercheurs.e.s français de cette thématique vaste et interdisciplinaire. Le périmètre scientifique est structuré de façon à répondre à des défis scientifiques primordiaux :

- mieux connaître la ressource disponible ;
- innover avec de nouveaux procédés de conversion thermochimique ;
- améliorer l'analyse des produits de conversion ;
- modéliser les systèmes ;
- définir les filières les plus adéquates répondant à des critères économiques et environnementaux.

Ce GDR a pour mission de fédérer l'ensemble des chercheurs dans ce domaine au-delà des clivages institutionnels et de promouvoir de nouvelles collaborations (ANR et Europe).



Pilote gazéification.  
© LRGP Nancy



Vue 3D d'une analyse GCXGC d'une huile de lignine.  
© Ircelyon

### THÉMATIQUES

- La ressource et sa diversité
- Les mécanismes réactionnels : vers une meilleure compréhension de la conversion
- Les réacteurs et procédés pour la conversion de la biomasse
- L'approche multi-échelle : des molécules aux réacteurs et filières



Biomasses lignocellulosique et algale.  
© D. Laurenti, Ircelyon

### PROSPECTIVES

La biomasse et les déchets issus de biomasse représentent aujourd'hui des ressources disponibles durables pour la production de produits chimiques, de carburants, d'additifs et de matériaux. Le développement de leur valorisation répond à une volonté internationale forte d'économiser les ressources, de maîtriser les consommations d'énergie et de lutter contre le changement climatique.

La valorisation de la biomasse nécessite le développement de nouveaux procédés, de nouveaux catalyseurs, de nouveaux réacteurs et de méthodes de caractérisation plus performantes. En effet, ceux-ci doivent s'adapter à des systèmes/fractions souvent très complexes et requièrent aussi le développement de méthodes de modélisation.

Au niveau international, la valorisation de la biomasse connaît un très fort regain d'intérêt en termes de travaux scientifiques et de développement de démonstrateurs. L'ensemble des groupes industriels affiche un engouement prononcé pour les bio-ressources et certains proposent déjà des bio-produits sur le marché, mais la plupart des projets industriels sont encore dans une phase de recherche et développement. Les objectifs ambitieux annoncés couvrent de multiples domaines comme : les bio-carburants, le biogaz, la production de synthons pour l'industrie chimique, la production de bio-matériaux, etc. L'existence de grands projets français tels que BioTfuel, Futurol, GAYA et Biogreen et de nombreux autres projets internationaux témoignent de l'intérêt de ces filières.

Quatre axes sont définis :

#### La ressource et sa diversité

Les acteurs de la ressource seront impliqués pour apporter un éclairage sur les ressources disponibles et les applications potentielles en fonction de leur composition ;

#### Les mécanismes réactionnels

Afin de définir les filières adéquates et d'améliorer les procédés, il faut bien comprendre les mécanismes réactionnels

qui produisent les charges complexes telles que les liquides issus de la biomasse (ou de déchets). Dans ce volet, les outils de modélisation, les réactions modèles et les techniques d'analyse sont discutés entre membres du GDR ;

#### Les réacteurs et procédés pour la conversion de la biomasse

Cet axe est dédié à l'échange et à la réflexion autour des réacteurs, à leur intégration globale dans le procédé (synergie réacteur/purification), pour permettre *in fine* la mise au point de procédés industriels viables et innovants ;

#### L'approche multi-échelle : des molécules aux réacteurs et filières

L'enjeu est de coupler les études à différentes échelles, d'inclure des études à l'échelle moléculaire (cinétique, mécanisme) dans des modèles de réacteur, d'inclure des modèles de réacteur dans des modèles de procédés et filières, d'utiliser ces modèles de filières pour conduire des analyses environnementales et économiques à l'échelle territoriale voire globale.

### CONTACTS

Directrice  
**Dorothee Laurenti (IRCELYON, Lyon)**  
[dorothee.laurenti@ircelyon.univ-lyon1.fr](mailto:dorothee.laurenti@ircelyon.univ-lyon1.fr)

Directeur adjoint  
**Anthony Dufour (LRGP, Nancy)**  
[anthony.dufour@univ-lorraine.fr](mailto:anthony.dufour@univ-lorraine.fr)  
<http://thermobio.cnrs.fr>

**GDR** Groupement  
de recherche  
**THERMOBIO** Conversion  
thermochimique de la biomasse  
et des déchets

# GDR CONCORD

## Couplage mécanique oxydation diffusion

67 chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de 15 laboratoires

### OBJECTIFS

L'objectif du GDR CONCORD est d'établir un dialogue entre des équipes françaises abordant l'oxydation haute température (HT) sous différents aspects, chimique et mécanique, approche expérimentale et modélisation, afin de motiver une approche pluridisciplinaire, en se focalisant plus spécifiquement sur le couplage oxydation/mécanique.

Les thèmes seront centrés sur l'identification, la compréhension et la modélisation des mécanismes impliqués lors de la croissance d'un oxyde sur un métal à HT, avec ou sans chargement mécanique extérieur. Une attention particulière sera portée aux aspects multi-échelles (spatiales et temporelles) et aux outils nécessaires à ce type d'étude, que ce soient les méthodes expérimentales, les outils théoriques et de modélisation numérique ou leurs couplages.



Surface de cuivre oxydée.

© Morgan Rusibowicz, PhD Thesis SIMaP 2020/UGA Grenoble-INP

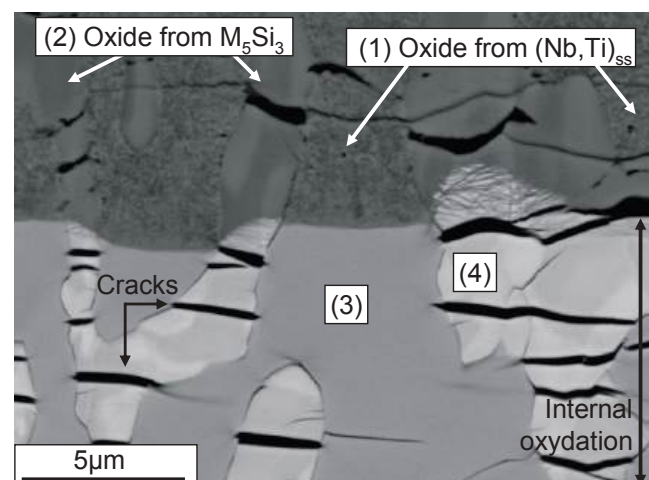


Module de flexion à haute température.

© Tom Sanviemvongsak, Thèse CIRIMAT 2020, Toulouse INP

### THÉMATIQUES

- Oxydation avec un chargement mécanique extérieur
- Genèse des déformations en oxydation haute température des métaux
- Mesures expérimentales
- Modélisation/simulation



Alliage base Niobium de type MASC oxydé 24h à 815°C sous air. Rupture mécanique des siliciures de renfort perpendiculairement au flux d'oxygène.

© Stéphane Mathieu, Institut Jean-Lamour, Univ. Lorraine

### PROSPECTIVES

#### OXYDATION AVEC UN CHARGEMENT MÉCANIQUE EXTÉRIEUR

Ce thème est consacré aux interactions chimie/physique/mécanique entre les phénomènes d'oxydation et la présence d'un champ mécanique extérieur, appliqué préalablement à l'oxydation ou de façon concomitante :

- identification de l'influence de certains paramètres sur le couplage entre chargement mécanique et oxydation à travers l'analyse des travaux existants dans la communauté ;
- identification des mécanismes physiques intervenant au premier ordre dans le couplage oxydation/mécanique et tentative de dresser des cartographies décrivant le comportement en oxydation de différentes classes de matériaux en fonction du niveau de chargement et de la température.

#### GENÈSE DES DÉFORMATIONS EN OXYDATION HAUTE TEMPÉRATURE DES MÉTAUX

L'objectif de ce thème est d'identifier les différents mécanismes impliqués dans la genèse des déformations et leurs interactions :

- lister les termes de sources et de relaxations potentiels pour chaque grand système oxyde thermique sur métal et identifier les couplages multi-physiques réellement significatifs ;
- confrontation aux mesures et modélisations afin de déterminer les sources de déformation prépondérantes en fonction de l'instant T et de la localisation spatiale (prise en compte des éléments de microstructure).

#### MESURES EXPÉRIMENTALES

Il existe différentes techniques permettant de mesurer les déformations générées lors de la croissance de l'oxyde à différentes échelles, ex et in situ. L'objectif de ce thème est d'optimiser les techniques à utiliser en fonction des systèmes étudiés et des échelles pertinentes, tant temporelles que spatiales :

- optimisation des approches expérimentales pour la détermination des déformations/contraintes dans l'oxyde et dans le métal ;

- optimisation des outils et méthodes d'investigation expérimentale pour mettre en évidence les couplages diffusion/microstructure/mécanique ;
- quantification des paramètres critiques pour l'apparition d'endommagements et leurs conséquences en termes de relaxation de contraintes.

#### MODÉLISATION/SIMULATION

Ce thème vise à faire le point sur les outils théoriques et de simulation numérique existants et pouvant contribuer à une meilleure analyse des mécanismes interagissant avec la génération de déformations lors de l'oxydation à haute température des métaux :

- état de l'art des approches de modélisation et de simulation à une échelle donnée afin de proposer des pistes vers une modélisation multi-physique ;
- état de l'art des approches de modélisation et de simulation existantes afin de proposer des pistes vers une modélisation multi-échelle ;
- intégration des propriétés d'adhérence des couches d'oxydes formées en relation avec la microstructure.

### CONTACTS

Directrice  
**Muriel Braccini (SIMaP, Grenoble)**  
[muriel.braccini@grenoble-inp.fr](mailto:muriel.braccini@grenoble-inp.fr)

Directrice adjointe  
**Marion Risbet (Roberval, Compiègne)**  
[marion.risbet@utc.fr](mailto:marion.risbet@utc.fr)

<https://gdr-concord.cnrs.fr>

**GDR** Groupement  
de recherche  
**CONCORD** Couplage mécanique  
oxydation diffusion

# GDR DUMBIO

## Durabilité et matériaux biosourcés

**160** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **30** laboratoires

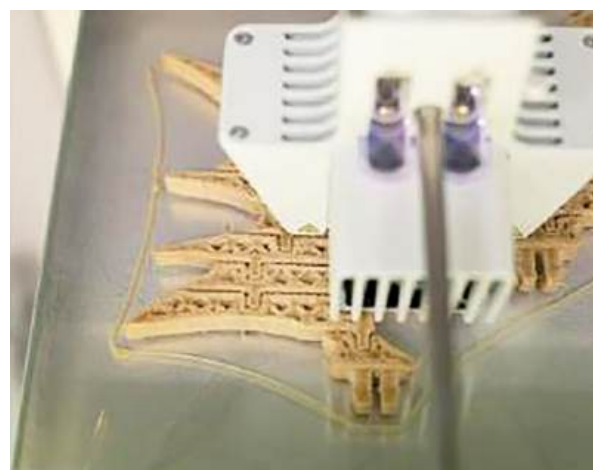
## OBJECTIFS

Les contraintes environnementales, énergétiques et économiques constituent des défis et opportunités qui permettent aux matériaux biosourcés et aux biopolymères de se positionner comme des alternatives d'intérêt aux molécules pétrosourcées. DUMBIO a pour but de partager les savoir-faire dans le domaine des matériaux biosourcés. DUMBIO vise également à revisiter la matière première et les

procédés de transformation des matériaux biosourcés de façon à faire émerger des fonctionnalités indispensables pour agrandir leurs champs d'application. Enfin, DUMBIO a pour objectif de développer des métriques et indicateurs susceptibles d'évaluer l'impact des nouvelles pratiques qui seront préconisées dans le cadre plus général de la bioéconomie.

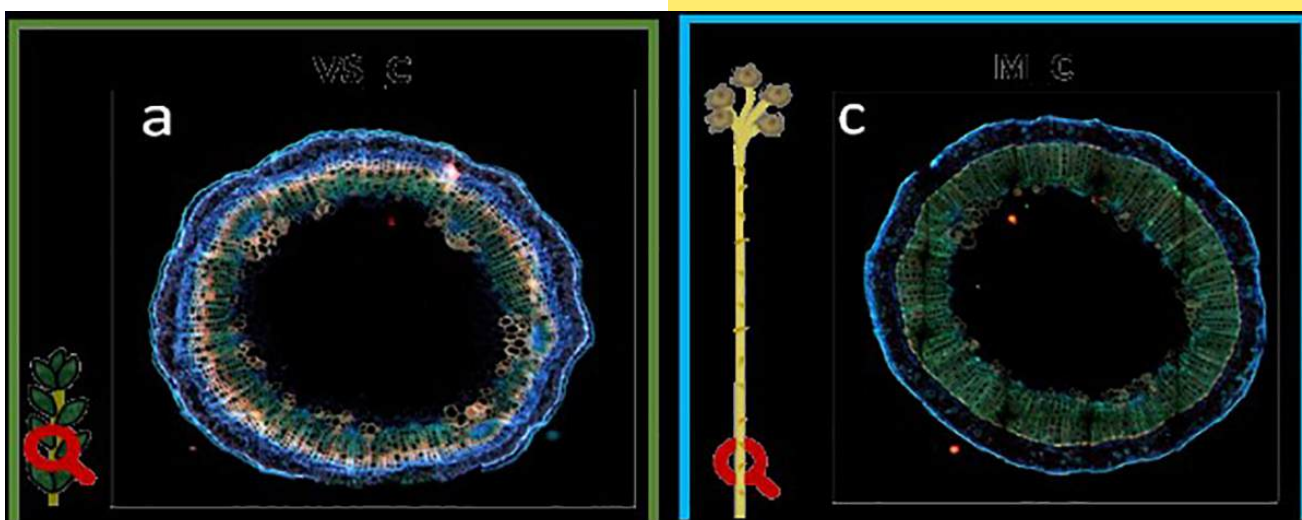
## THÉMATIQUES

- Matériaux biosourcés et biopolymères massiques
- Matériaux biosourcés et biopolymères solvatés
- Procédés pour matériaux avancés
- Impacts environnementaux, économiques et sociétaux



Impression 3D d'un agrocomposite  
@ Marie Dumain Photographies

Tige de chanvre  
@ Johnny Beaugrand BIA Nantes



## PROSPECTIVES

### MATÉRIAUX BIOSOURCÉS ET BIOPOLYMÈRES MASSIQUES

Il s'agit de produire de nouveaux matériaux de structure biosourcés comme des (nano)composites entièrement biosourcés. De nouvelles sources de biopolymères issues de co-produits de fractionnement, de sources renouvelables innovantes ou de déchets seront également envisagées dans l'objectif de valoriser l'intégralité de la ressource. Le potentiel de ces systèmes massiques en termes de propriétés spécifiques (mémoire de forme, propriétés optiques, ...) sera exploré dans le but d'adresser des applications de niche à forte valeur ajoutée.

### MATÉRIAUX BIOSOURCÉS ET BIOPOLYMÈRES SOLVATÉS

Il s'agit de construire une vaste librairie de synthons multifonctionnels comme précurseurs de systèmes solvatés d'intérêt (suspensions, émulsions, coacervats, hydrogels, ionogels, membranes...) via la mise en œuvre de chimies respectueuses, efficaces et sélectives. En milieu solvant, ces synthons seront assemblés en structures plus ou moins complexes dont les relations structure/propriété seront établies à différentes échelles spatiale et temporelle.

### PROCÉDÉS POUR MATÉRIAUX AVANCÉS

On s'intéressera au développement et à l'optimisation de procédés d'élaboration des matériaux élaborés dans les deux autres axes thématiques (fabrication additive, milli- et microfluidique, électrofilage,



Impression 3D d'un agrocomposite  
@ Marie Dumain Photographies

modification par ultrason, micro-onde ou plasma) considérés individuellement ou couplés. Nous proposerons des évolutions organisationnelles de ces procédés permettant l'optimisation

de l'efficacité de chacune des étapes de la transformation en prenant en compte la variabilité de la matière première (liée soit aux variations climatiques, géographiques, biologiques de la biomasse, soit au gisement des matériaux recyclés, soit enfin aux procédés d'extraction et de recyclage mis en œuvre pour recouvrer les biopolymères et les synthons).

### IMPACTS ENVIRONNEMENTAUX, ÉCONOMIQUES ET SOCIÉTAUX

Les matériaux et leurs procédés d'élaboration issus des travaux des 3 autres axes seront évalués via des métriques et indicateurs liés notamment à une économie circulaire et durable. Il s'agit de quantifier l'impact environnemental et économique de tels synthons et matériaux biosourcés sur tous les stades du cycle de vie : extraction, fonctionnalisation, mise en œuvre/transformation tout en cherchant à améliorer la circularité des flux, le recyclage des produits et des déchets ainsi qu'à minimiser la toxicité éventuelle des produits issus de leur (bio)dégradation. Il s'agit d'envisager dès les premiers stades de transformation une utilisation en cascade des ressources et ainsi étendre leur disponibilité. Par conséquent, la réflexion dans cet axe n'intègre pas seulement les aspects scientifiques traités dans les trois axes précédents mais aussi les dimensions économique et sociétale au croisement de champs disciplinaires plus centrés sur les préoccupations sociétales, humaines et agro-économiques.

## CONTACTS

Directeur  
**Christophe Chassenieux (IMMM, Le Mans)**  
[christophe.chassenieux@univ-lemans.fr](mailto:christophe.chassenieux@univ-lemans.fr)  
Directrice adjointe  
**Isabelle Capron (BIA-INRAE, Nantes)**  
[isabelle.capron@inrae.fr](mailto:isabelle.capron@inrae.fr)

Site internet du GDR : en construction

**GDR** Groupement  
de recherche  
**DUMBIO** Durabilité  
et matériaux biosourcés

# GDR HYDRATES

## Hydrates de gaz

**103** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **29** laboratoires

### OBJECTIFS

La thématique des hydrates de gaz traverse des champs disciplinaires variés, touchant l'astrophysique, les géosciences, le génie des procédés et les sciences moléculaires. Longtemps considérés et examinés principalement comme une nuisance industrielle (obturation des "pipelines") et géologique (instabilité des fonds océaniques), ces "glaces nanoporeuses" ouvrent aujourd'hui de nouvelles perspectives applicatives (stockage/séparation/captage de gaz, réfrigération secondaire, purification de l'eau, etc.) et de nouvelles questions fondamentales (mécanismes de formation/cristallogénèse, existence naturelle dans le système solaire, impact sur les atmosphères et climats planétaires, etc.). Répondre à ces défis nécessite des actions concertées et pluridisciplinaires auxquelles le GDR HYDRATE s'attèle.

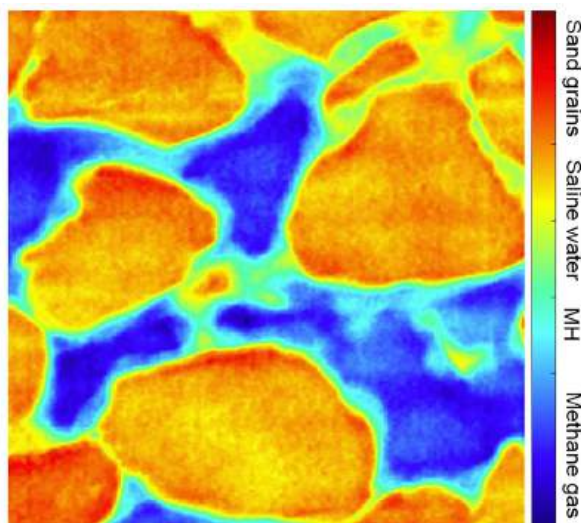


Image de tomographie X (500 µm x 500 µm)  
d'un hydrate sédimentaire artificiel.

© Anh-Minh Tang, Laboratoire Navier - École des ponts ParisTech

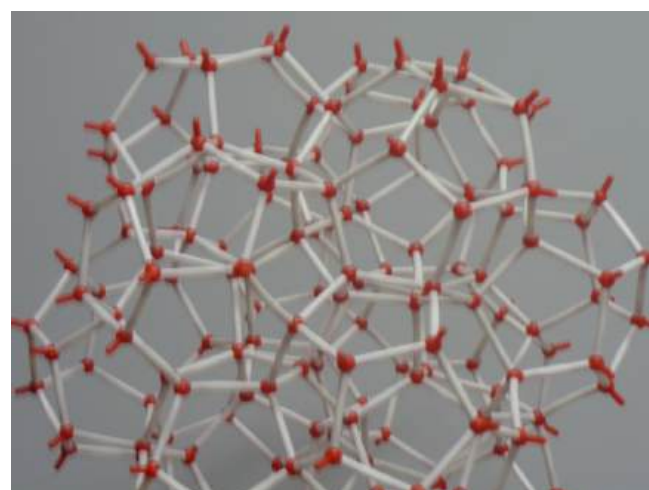


Les hydrates de gaz existent-ils ailleurs  
que sur Terre ?

© Arnaud Desmedt, ISM — CNRS — Univ. Bordeaux

### THÉMATIQUES

- Sciences moléculaires et thermodynamique
- Génie des procédés
- Géosciences
- Astrophysique et planétologie



Représentation des nanocages aqueuses d'un  
hydrate de gaz.

© Sylvain Picaud, UTINAM - CNRS-Univ. Besançon

### PROSPECTIVES

Le périmètre scientifique du GDR se décline autour d'un socle transversal, dédié aux sciences moléculaires et visant à améliorer la compréhension des phénomènes à l'échelle moléculaire (physico-chimie, spectroscopie, cristallographie, etc.), pour appréhender les propriétés macroscopiques (thermodynamique, cinétique, etc.). De telles études sont indispensables aux pôles de recherche consacrés au génie des procédés et technologies, géosciences et astrophysique. Parmi les grands défis scientifiques dans le domaine des hydrates (liste non limitative), des axes transverses ont été identifiés comme prioritaires pour leur apport tant en termes de connaissances fondamentales qu'en termes d'impact pour les innovations environnementales et énergétiques à venir.

#### INTERACTIONS HYDRATE-SUBSTRAT SOLIDE

Dans les conditions naturelles ou industrielles, les hydrates de gaz se forment en interaction avec des substrats (inorganiques, organiques, (mésoporeux, etc.). Ces interactions contrôlent ainsi la répartition des hydrates dans les sédiments porteurs, ou dans d'autres substrats (mésoporeux. Elles ont un impact sur le caractère promoteur/inhibiteur de ces derniers constaté empiriquement, mais sont peu comprises.

#### THERMODYNAMIQUE HORS-ÉQUILIBRE ET MÉTASTABILITÉ

Les hydrates peuvent se former selon des compositions non prédites par les modèles purement thermodynamiques. Les propriétés cinétiques de cristallisation et de métastabilité sont loin d'être parfaitement identifiées. Or, l'identification des couplages thermo-cinétiques est une question ouverte et intéresse les sciences moléculaires tout autant que les applications industrielles, les sciences de la Terre ou les sciences de l'univers.

#### TAUX D'OCCUPATION DES CAGES DES HYDRATES DE GAZ

Les hydrates sont connus pour leur grande capacité à stocker et capter sélectivement du gaz. Nos connaissances

actuelles des paramètres contrôlant le taux d'occupation des cages sont très limitées. Pourtant, c'est un paramètre indispensable pour estimer la capacité de stockage des gaz dans ce matériau, avec des applications évidentes en génie des procédés, géosciences et astrophysique.

#### FORMATION EN CONDITION AUX LIMITES

Les conditions rencontrées dans le cœur des planètes ou encore à la surface de comètes diffèrent de celles rencontrées en environnement naturel ou industriel. La formation des hydrates de gaz dans des conditions de pressions ultra-basses ou très élevées (GPa) a fait, à ce jour, l'objet de très peu d'études. Outre leur intérêt fondamental pour les sciences moléculaires, les géosciences et l'astrophysique, de telles études ouvrent de nouvelles perspectives pour les problématiques de stockage de gaz.

### CONTACTS

Directeur  
**Arnaud Desmedt (ISM, Bordeaux)**  
[arnaud.desmedt@u-bordeaux.fr](mailto:arnaud.desmedt@u-bordeaux.fr)

Directeurs adjoints  
**Livio Ruffine (IFREMER, Brest)**  
[livio.ruffine@ifremer.fr](mailto:livio.ruffine@ifremer.fr)

**Daniel Broseta (LFCR, Pau)**  
[daniel.broseta@univ-pau.fr](mailto:daniel.broseta@univ-pau.fr)

<http://hydrates.cnrs.fr>

**GDR** Groupement  
de recherche  
**HYDRATES** Hydrates de gaz

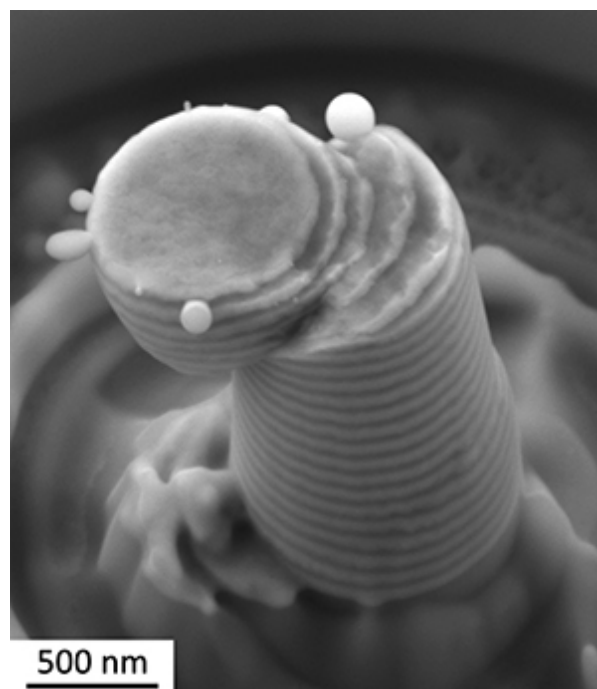
# GDR HEA

## Métallurgie des alliages à haute entropie et concentrés complexes

200 chercheuses et chercheurs impliqués au sein de 21 laboratoires

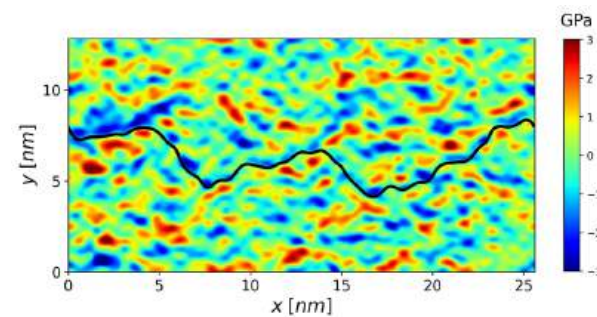
### OBJECTIFS

Le GDR HEA se donne comme principale mission de pérenniser, de structurer et de coordonner les actions nationales dans le domaine attractif des alliages à haute entropie. Autour des acteurs nationaux, le GDR a vocation à privilégier et promouvoir une recherche à visée fondamentale sur des systèmes complexes, tout en encourageant transversalité, interdisciplinarité et ouverture à l'international. Ainsi, à travers l'étude de ces matériaux émergents, les principaux objectifs sont d'explorer le potentiel de ces objets innovants en revisitant, voire ré-interprétant certains concepts métallurgiques de base à l'aune de nouveaux outils, expérimentaux ou théoriques. Pour ce faire, des groupes thématiques ont été créés autour d'axes aux contours clairs, sur la base des principaux enjeux du domaine.



Essai de compression d'un micro-pilier de nanolaminé  $\text{Al}_{0.25}\text{CoCrCuFeNi} / \text{Al}$ .

© Matteo Ghidelli, LSPM, Villetaneuse

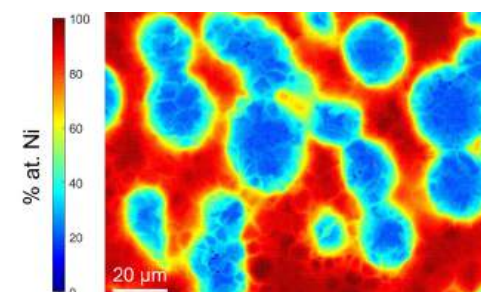


Simulation élastique d'une dislocation (ligne noire) évoluant dans un champ de contraintes internes caractéristique d'un alliage aléatoire concentré de structure cubique à faces centrées.

© Pierre-Antoine Geslin, MatéIS, Lyon

### THÉMATIQUES

- Conception d'alliages et thermodynamique des systèmes complexes
- Genèse des microstructures
- Liens microstructures/propriétés mécaniques
- Influence des effets environnementaux sur les propriétés des HEAs/CCAs
- Propriétés fonctionnelles
- HEAs/CCAs et enjeux environnementaux (axe transversal)



Cartographie de la concentration en nickel dans un alliage à haute entropie chimiquement architecturé obtenu par frittage flash.

© Mathilde Laurent-Brocq, ICMPE, Thiais

### PROSPECTIVES

Les activités du GDR visent à consolider l'organisation et la visibilité des recherches sur les alliages à haute entropie, en favorisant l'émergence de nouveaux sujets. Ce travail est mené grâce à la mise en place d'une structuration thématique qui suit l'évolution du domaine. Les travaux sont regroupés autour d'axes allant de la conception à l'étude des propriétés, en tentant de placer la métallurgie de ces objets sous l'angle de la réduction de l'impact environnemental.

#### CONCEPTION D'ALLIAGES & THERMODYNAMIQUE

Le thème est dédié à l'exploration du vaste espace compositionnel de ces alliages par l'identification de différentes approches, allant du criblage empirique aux méthodes avancées (Calphad/modèles physiques). L'intégration de techniques combinatoires et de l'intelligence artificielle est également centrale. Les stratégies consistant à ajuster la composition des alliages pour induire des effets synergiques lors de la déformation seront également identifiées.

#### GENÈSE DES MICROSTRUCTURES

Ce groupe vise à identifier les processus de préparation et de transformation des alliages HEAs/CCAs. Cela nécessite d'appréhender les interactions entre procédés de fabrication et microstructures, en étudiant les mécanismes physiques sous-jacents. Le groupe étudiera l'influence de la complexité chimique sur les structures de solidification, les interfaces et la ségrégation chimique grâce à une approche combinant expériences et modélisations.

#### MICROSTRUCTURES & PROPRIÉTÉS MÉCANIQUES

Ce groupe se concentre sur la compréhension et la modélisation des mécanismes de déformation des alliages HEAs/CCAs sous diverses sollicitations. Il vise ainsi à favoriser les échanges sur les liens entre chimie des alliages, propriétés mécaniques, microstructure et mécanismes de déformation en combinant approches expérimentales et théoriques à différentes échelles.

#### EFFETS ENVIRONNEMENTAUX

L'exploration du potentiel des HEAs/CCAs visant à remplacer les solutions matériaux existantes dans des environnements extrêmes est un challenge important. Il nécessite l'analyse de leur comportement face aux contraintes thermiques, aux atmosphères oxydantes/corrosives et à l'irradiation. Des études théoriques et expérimentales approfondies seront menées pour évaluer leurs performances.

#### PROPRIÉTÉS FONCTIONNELLES

L'intérêt pour ces propriétés des HEAs/CCAs croît dans la communauté. La préparation d'alliages en couches minces suscite un fort intérêt académique et nécessite une compréhension des propriétés. Les nano-alliages multicomposants montrent également un fort potentiel en catalyse et production d'hydrogène. Les alliages complexes offrant des perspectives en biocompatibilité seront également identifiés.

### CONTACTS

Directeur  
**Jean-Philippe Couzinié (ICMPE, Thiais)**  
[jean-philippe.couzinie@cnrs.fr](mailto:jean-philippe.couzinie@cnrs.fr)

Directrice adjointe  
**Céline Varvenne (MatéIS, Lyon)**  
[celine.varvenne@cnrs.fr](mailto:celine.varvenne@cnrs.fr)

<https://gdr-hea.cnrs.fr/>

**GDR** Groupement de recherche  
**HEA Métallurgie des alliages à haute entropie et concentrés complexes**

# GDR MSI

## Imagerie par spectrométrie de masse

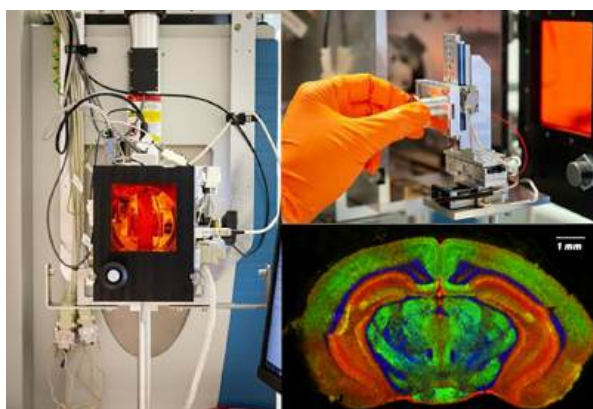
**168** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **42** laboratoires

### OBJECTIFS

L'imagerie par spectrométrie de masse permet d'obtenir la cartographie d'espèces chimiques à la surface d'un échantillon ou dans son volume.

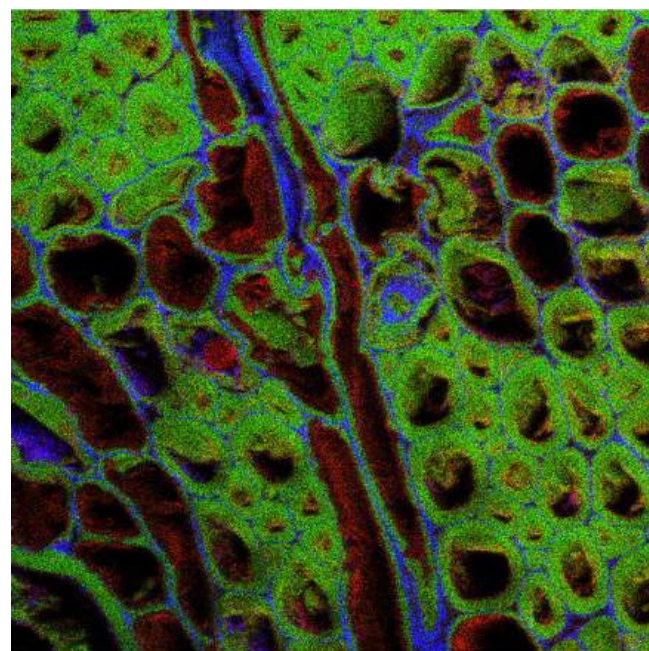
Le GDR MSI se donne pour ambition de regrouper les différentes communautés d'experts académiques et les partenaires sociaux-économiques, possédant des outils complémentaires, mais qui ont des questionnements scientifiques proches malgré la grande variété d'objets d'étude. Les ambitions du GDR sont de :

- fédérer les acteurs - plateformes, équipes de recherche, utilisateurs, constructeurs - afin de faire émerger des projets novateurs et transversaux ;
- promouvoir et organiser des actions de formation en imagerie par spectrométrie de masse à travers des sessions ou des ateliers scientifiques et de formation ;
- recenser les plateformes et répertorier les compétences/savoir-faire, les équipements, etc. ;
- former les jeunes chercheurs en imagerie par spectrométrie de masse.



Imagerie par spectrométrie de masse MALDI.

© Nicolas Desbenoit / Andreas Römpf, University of Bayreuth

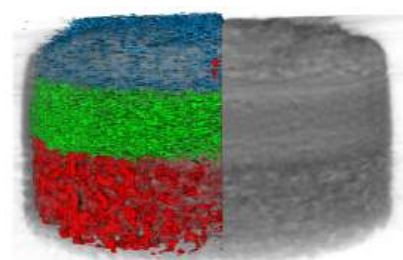


Bois tropical par imagerie TOF-SIMS.

© Alain Brunelle et Quentin Vanbellingen, CNRS

### THÉMATIQUES

- Préparation des échantillons
- Quantification & semi-quantification
- Instruments & acquisitions
- Stockage & retraitement des données d'imagerie
- Imagerie multimodale
- Imagerie *in vivo* en temps réel
- Profilage 3D



Analyse FIB-TOF-SIMS 3D/tomographie rayons X d'une pile à combustible.

© Jean-Paul Barnes, CEA

### PROSPECTIVES

La spectrométrie de masse est une méthode analytique bien établie pour accéder à la détection, la quantification et la caractérisation structurale des espèces chimiques en mélange complexe. L'imagerie par spectrométrie de masse ou MSI permet d'ajouter une nouvelle dimension avec un accès direct à la distribution de ces mêmes espèces chimiques sur des surfaces ou volumes. La MSI a connu un rapide essor depuis 25 ans avec un nombre croissant de défis scientifiques qui sont au cœur de ce GDR. Ces enjeux analytiques sont essentiellement méthodologiques et technologiques, et sont en lien avec divers domaines d'expertise ou objets d'étude. À ceux-là s'ajoute un enjeu essentiel pour le traitement des données afin d'extraire les informations les plus pertinentes nécessaires à l'interprétation des données. Le GDR MSI a donc vocation à créer une dynamique favorable autour de ces enjeux en s'adressant à chacune des thématiques évoquées. Il doit commencer par faire se connaître des différentes communautés et créer des échanges entre des acteurs provenant de disciplines très différentes.

Ce GDR et cette structuration permettront :

- un recensement et une organisation en réseau des équipes de recherche et des plateformes associées à la MSI ;
- une standardisation de procédures telles que la préparation des échantillons, le traitement des données, etc. ;
- la mise en place d'études d'imagerie multimodale ;
- l'émergence de projets collaboratifs répondant à des appels à projets nationaux ou européens ;
- l'émergence de formations, en particulier la mise en place d'écoles thématiques, webinaires, workshops, etc. ;

Le GDR MSI souhaite également :

- rayonner internationalement avec notamment et en premier lieu l'intégration de laboratoires francophones (Belgique, Québec, Liban, Luxembourg, Suisse, etc.). Des discussions seront également amorcées avec les sociétés savantes internationales en les informant de l'existence

de la première structuration au monde regroupant l'ensemble des techniques d'imagerie par spectrométrie de masse. Un des objectifs sera d'organiser un grand événement international à l'issue de ce GDR ;

- former des jeunes chercheur.se.s en créant un Club jeunes regroupant les doctorant.e.s et post-doctorant.e.s, leur permettant de prendre une part active dans la vie du GDR MSI, d'être moteur pour des actions nouvelles, en particulier la suite à donner à l'issue du premier mandat du GDR MSI. Ce Club jeunes permettra également de mettre en place un réseau pour le devenir des jeunes diplômés et leur intégration dans le monde de la recherche académique, « au niveau national et international, et industrielle ».

### CONTACTS

Directeur  
**Nicolas Desbenoit (CBMN, Bordeaux)**  
[n.desbenoit@cbmn.u-bordeaux.fr](mailto:n.desbenoit@cbmn.u-bordeaux.fr)

Directeurs adjoints  
**Alain Brunelle (LAMS, Paris)**  
[alain.brunelle@cnrs.fr](mailto:alain.brunelle@cnrs.fr)  
**David Touboul (ICSN, Gif-sur-Yvette)**  
[david.touboul@cnrs.fr](mailto:david.touboul@cnrs.fr)

<https://gdr-msi.cnrs.fr/>

**GDR** Groupement  
de recherche  
**MSI** Imagerie par spectrométrie  
de masse

# GDR MAPYRO

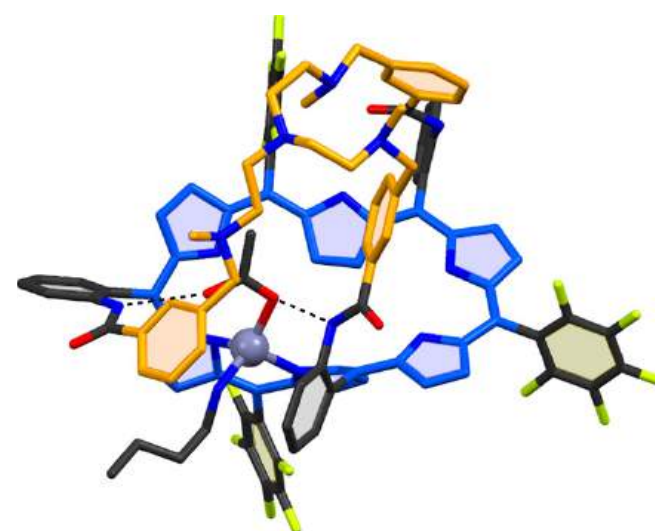
## Macrocycles pyrroliques

**75** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **23** laboratoires

## OBJECTIFS

La mission du GDR MAPYRO est de fédérer les différents groupes français impliqués dans la chimie des macrocycles polypyrroliques comprenant des spécialités très variées telles que la synthèse organique, la chimie de coordination, la chimie supramoléculaire, la catalyse homogène et hétérogène, l'activation de petites molécules, l'électro et la photoactivation.

Le GDR permet un échange régulier des connaissances, apporte des solutions à des problématiques précises via des collaborations au cours desquelles des chercheurs peuvent se déplacer dans un laboratoire du groupement pour être formés à des techniques et/ou pratiques nouvelles.

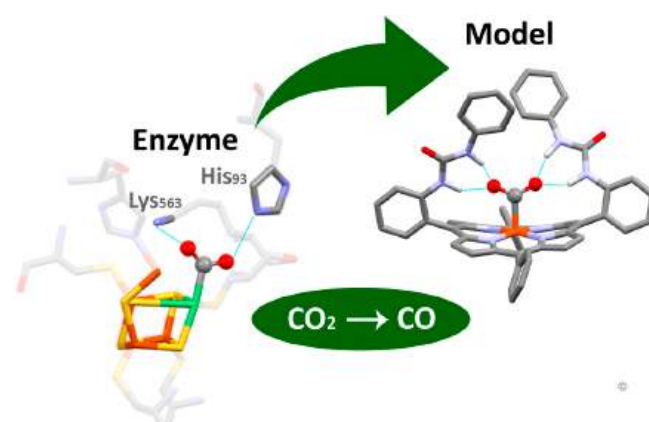


Hexaphyrine chapeautée : métallorécepteur chiral et Möbius-aromatique.

© Stéphane Le Gac, CNRS/Université de Rennes

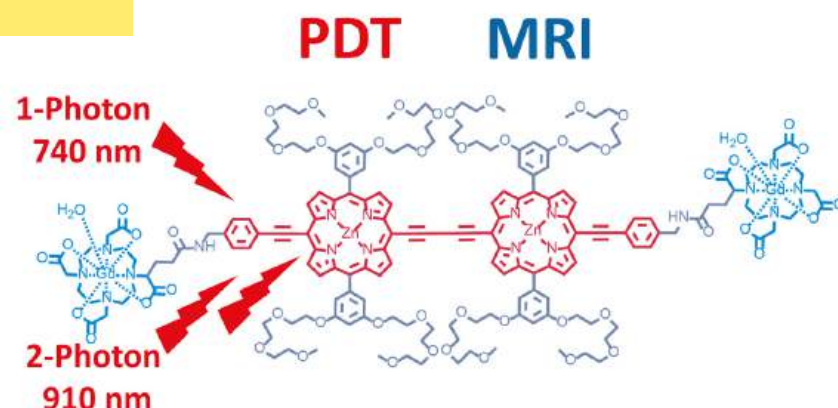
## THÉMATIQUES

- Catalyseurs biomimétiques et activation de petites molécules
- Chimie supramoléculaire des assemblages porphyriniques
- Les macrocycles pyrroliques en chimie thérapeutique



Réduction biomimétique du  $\text{CO}_2$

© Zakaria Halime, CNRS/Université Paris-Saclay



Bis-porphyrine fonctionnalisée : agent thérapeutique bimodal.

© Sébastien Jenni, Université de Strasbourg

## PROSPECTIVES

Les porphyrines et leurs dérivés sont impliqués dans des processus essentiels des mondes animal et végétal. Pour ces raisons, la porphyrine est souvent appelée "molécule de la vie". D'ailleurs, l'étude approfondie de l'implication de ces macrocycles dans les phénomènes biologiques indispensables à la vie sur Terre a rapidement attiré l'attention des chimistes, générant une communauté des polypyrroles cycliques large et variée que MAPYRO a pour but d'animer.

En structurant les différentes équipes partenaires au niveau national et en renforçant les liens de nombreuses d'entre elles à l'international, le défi de MAPYRO est de tirer parti des macrocycles pyrroliques pour trouver de nouvelles solutions dans trois axes de recherche majeurs et d'impact sociétal important :

### ACTIVATION DE PETITES MOLÉCULES ET CATALYSEURS BIOMIMÉTIQUES

Parmi les réactions emblématiques concernées, priment la réduction du dioxygène, la réduction du dioxyde de carbone et l'oxydation des substrats organiques par transfert d'atomes d'oxygène ou d'azote. L'étude des mécanismes catalytiques, la caractérisation des intermédiaires réactionnels ainsi que la conception de modèles optimisés mobilisent une force importante dans ce GDR.

### CHIMIE SUPRAMOLÉCULAIRE DES ASSEMBLAGES PORPHYRINIQUES

Il est possible de concevoir et d'étudier de nouveaux assemblages élaborés à partir de polypyrroles cycliques et présentant des propriétés spécifiques (optiques, électrochimiques, photochimiques...).

Les propriétés associées aux assemblages supramoléculaires porphyriniques ouvrent de nombreuses perspectives pour la transmission et le stockage de l'information grâce à la commutation des systèmes, le développement des matériaux auto-réparants, le transport et la restitution de molécules thérapeutiques. Qui plus est, la chimie de coordination de nouveaux macrocycles (isomériques, contractés, étendus...) reste entièrement à découvrir, à comprendre et à maîtriser.

## LES MACROCYCLES PYRROLIQUES EN CHIMIE THÉRAPEUTIQUE

Depuis longtemps, les macrocycles pyrroliques, de par leur tropisme pour les cellules cancéreuses, leur capacité à coordonner des cations, leur stabilité et leurs propriétés de photosensibilisateurs, sont des acteurs crédibles dans différents domaines thérapeutiques majeurs tels que la lutte anticancéreuse, antimicrobienne... Ainsi, au niveau national, plusieurs groupes sont actifs pour la conception et l'élaboration de nouveaux macrocycles pyrroliques dans les domaines de la photothérapie, de la radio-immunothérapie, mais aussi de l'imagerie et de la théranostique.

## CONTACTS

Directeur  
**Claude Gros (ICMUB, Dijon)**  
[claud.gros@u-bourgogne.fr](mailto:claud.gros@u-bourgogne.fr)

Directrice adjointe  
**Stéphanie Durot (LSAMM, Strasbourg)**  
[sdurot@unistra.fr](mailto:sdurot@unistra.fr)

Directeur adjoint  
**Zakaria Halime (ICMMO, Saclay)**  
[zakaria.halime@universite-paris-saclay.fr](mailto:zakaria.halime@universite-paris-saclay.fr)

<https://mapyro.chimie.unistra.fr>

**GDR** Groupement de recherche  
**MAPYRO** Macrocycles pyrroliques



# GDR NAMASTE

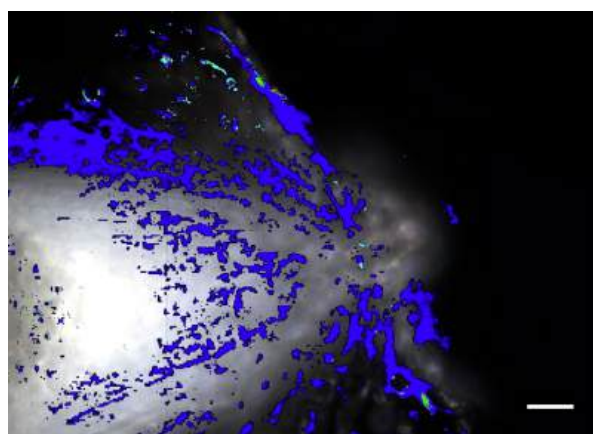
**Nanomatériaux manufacturés, toxicologie, écotoxicologie et risques : vers un développement maîtrisé**

**130** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **54** laboratoires

## OBJECTIFS

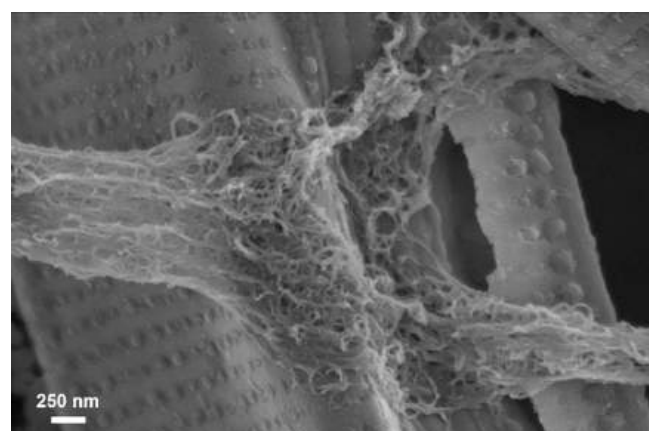
Le GDR NaMasTE a pour mission de structurer les communautés de chercheurs français travaillant sur les thématiques de la toxicité, de l'impact environnemental (écotoxicité) et des risques pour le développement des nanomatériaux. Il s'intéresse spécifiquement aux nanomatériaux manufacturés, actuels ou futurs fabriqués intentionnellement pour leurs propriétés, afin de construire un plan d'action pour accompagner une innovation mieux maîtrisée et plus durable.

Le GDR est structuré selon 3 axes de travail interconnectés par les notions de «safer by design» et une approche intégrée de type «une seule santé» (One-Health) : approche pluridisciplinaire de la notion de risque, d'écoconception des nanomatériaux manufacturés, d'évaluation réaliste de l'impact sur la santé et sur l'environnement tout au long du cycle de vie.



Nanoparticules de  $\text{CeO}_2$  (pixels colorés) à l'apex racinaire d'*Arabidopsis thaliana*  
Echelle 20µm

© BIAM/LEMIRE Aix-Marseille

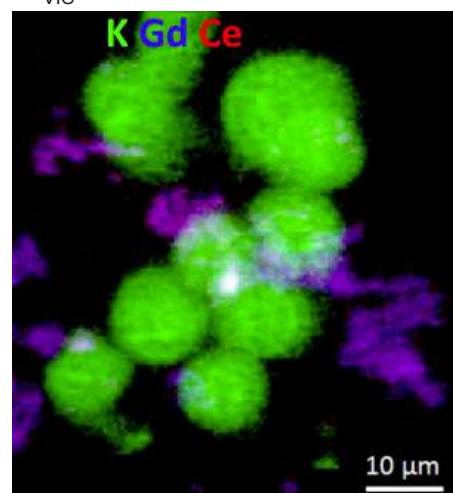


Diatomées, biofilm et nanotubes de carbone

© CIRIMAT, Toulouse, CRBE, Toulouse

## THÉMATIQUES

- Développement durable et innovation maîtrisée par l'écoconception des nanomatériaux
- Toxicologie, (éco)toxicologie, risques et impacts
- Approche «One Health» tout au long du cycle de vie



Cartographie µ-XRF de macrophages exposés à des nanoparticules de  $\text{GdCeO}_2\text{S}$

© LCMCP, Paris & IMRB, Créteil

## PROSPECTIVES

Le GDR NaMasTE s'intéresse au développement maîtrisé des nanomatériaux (NM) manufacturés en tenant compte de la pluralité des communautés concernées. Nous visons à systématiser les études de danger aux premiers stades de conception des NM afin d'accroître notre connaissance et notre compréhension des risques en amont de toute innovation. Le GDR NaMasTE se place dans le contexte One Health et intègre une approche des NM tout au long de leur cycle de vie.

### IDENTIFIER ET COMPRENDRE LES RISQUES LIÉS AUX NANOMATÉRIAUX MANUFACTURÉS

Favoriser les échanges et le montage de projets de recherche collaboratifs entre chercheurs issus de tous les organismes et agences nationales impliqués est essentiel pour assurer une compréhension globale du sujet.

### ÉCOCONCEPTION DE NANOMATÉRIAUX MANUFACTURÉS PLUS SÛRS

Comprendre comment la chimie peut permettre de rendre les NM plus sûrs mais aussi de les synthétiser de manière plus durable et respectueuse de l'environnement fait partie des objectifs essentiels du GDR.

### ÉVALUATION (ÉCO)TOXICOLOGIQUE DES NANOMATÉRIAUX DANS DES CONDITIONS RÉALISTES D'EXPOSITION AUX DIFFÉRENTES ÉTAPES DE LEUR CYCLE DE VIE

Seules l'harmonisation des modèles (modèles in vitro avancés, modèles environnementaux intégrés, modèles d'exposition réalistes) et la mise en place de nouvelles méthodes d'évaluation des effets (éco)toxiques des NM permettront leur développement maîtrisé. Ceci passe par l'interaction avec les agences de normalisation et l'implication des chercheurs dans ce domaine.

### STRUCTURER LA RECHERCHE EN FÉDÉRANT UN RÉSEAU INTER-DISCIPLINAIRE

Le GDR NaMasTE rassemble des chercheurs de disciplines variées telles que la chimie des (nano)matériaux, la physi-

co-chimie, la toxicologie et l'écotoxicologie, la métrologie, l'évaluation des risques, mais aussi le droit et la sociologie. En favorisant les échanges, le GDR NaMasTE offre le moyen de créer une nouvelle dynamique de recherche en France, plus compétitive au niveau international.

### CONTRIBUER À LA FORMATION DES CHERCHEURS

La formation des chercheurs est au cœur de nos préoccupations et le GDR prévoit l'organisation d'une école thématique ainsi que la mise en place de séries de webinaires thématiques destinés à favoriser l'interdisciplinarité et à élargir la communauté à de nouvelles équipes.

### OUVERTURE VERS LA SOCIÉTÉ

Les applications des NM sont très variées et concernent de nombreux produits du quotidien mais aussi des applications en relation avec la culture et le soin des plantes ou le traitement de l'eau. Il est impératif que la société au sens large (associations de citoyens, mais aussi d'industriels) soit impliquée dans ces recherches.

## CONTACTS

Directeur  
**Emmanuel Flahaut (CIRIMAT, Toulouse)**  
[emmanuel.flahaut@cnrs.fr](mailto:emmanuel.flahaut@cnrs.fr)

Directrice adjointe  
**Corinne Chanéac (C'Nano, Paris)**  
[corinne.chaneac@cnrs.fr](mailto:corinne.chaneac@cnrs.fr)

<https://gdr-namaste.cnrs.fr>

**GDR** Groupement de recherche  
**NaMasTE Nanomatériaux manufacturés, toxicologie, écotoxicologie et risques : vers un développement maîtrisé**

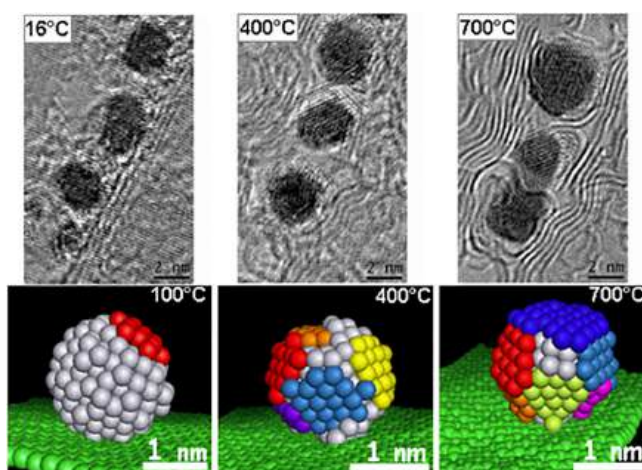
# GDR NINO

## Nanostructures inorganiques par chimie en solution

**300** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **50** laboratoires

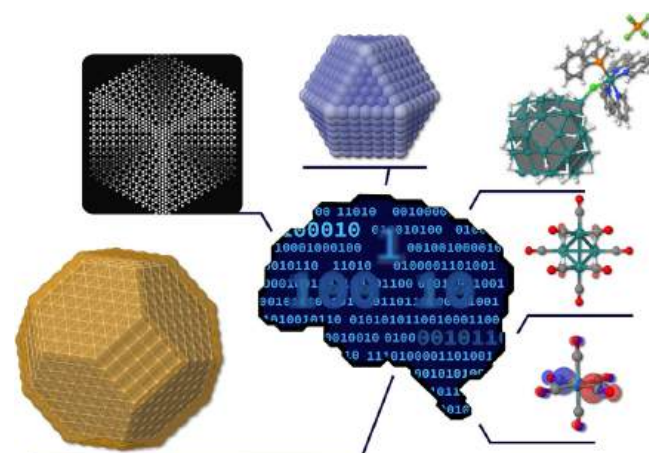
### OBJECTIFS

- Fédérer et structurer la communauté française autour d'une thématique pluridisciplinaire dont les activités de recherche sont en lien étroit avec l'étude des nanostructures inorganiques synthétisées par voies chimiques en solution ;
- Tirer parti du savoir-faire de chacun pour émuler l'ensemble de la communauté dans un effort commun vers un objectif : la synthèse rationalisée des nanostructures inorganiques vers des propriétés et des fonctionnalités optimisées ou nouvelles ;
- Favoriser l'émergence de projets collaboratifs interdisciplinaires nationaux, européens (Horizon Europe) et internationaux ;
- Organiser des rencontres scientifiques ;
- Contribuer à la formation des étudiant-e-s et des chercheur-se-s.



Évolution thermique par MET de nanoparticules de Pt déposées sur du graphène multi-feuillets et simulation par dynamique moléculaire.

© Ovidiu Ersen et Hervé Bulou :  
Institut de physique et de chimie des matériaux de Strasbourg (IPCMS), CNRS - Université de Strasbourg

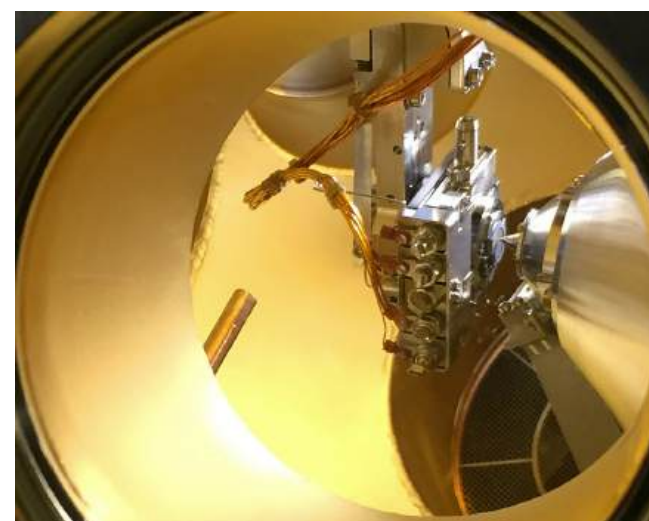


Modélisation de la structure et des propriétés du précurseur à la nanoparticule.

© Romuald Poteau : Laboratoire de physique et chimie des nano-objets (LPCNO), Université Paul-Sabatier.

### THÉMATIQUES

- Formation : mécanismes de nucléation, croissance et mûrissement
- Propriétés : relations « structure-propriété » et optimisation
- Mise en œuvre : implémentation optimisée



Porte-échantillon pour l'analyse XPS à pression ambiante de nanomatériaux pour la catalyse. Ligne TEMPO-BIS, synchrotron SOLEIL.

© David Portehault : Laboratoire chimie de la matière condensée de Paris (LCMCP), Sorbonne Université-CNRS

### PROSPECTIVES

Les nanostructures jouent un rôle important dans des domaines applicatifs très variés. L'optimisation de leurs performances exige la modulation de leurs propriétés. Dans un contexte international très compétitif, une structuration du potentiel scientifique français offre l'opportunité d'exploiter les avancées technologiques récentes (techniques de caractérisation avancées, microfluidique, IA...) vers une recherche de très haut niveau autour de l'élaboration de nano-objets inorganiques et de leur intégration dans des dispositifs fonctionnels. NINO est structuré selon trois thématiques, elles-mêmes subdivisées en trois axes transversaux : l'élaboration des nanostructures, leur caractérisation et les outils théoriques mis en œuvre pour une compréhension optimale des processus de formation et un contrôle ciblé des propriétés.

Dans le cadre de NINO nous allons :

- communiquer sur l'état de l'art et les futures directions de recherche en ce qui concerne la structure atomique et le processus de formation de nano-objets ;
- identifier et dépasser les limites des méthodes de production à grandes échelles de nano-objets bien définis (synthèses en batch, en flux continu) ;
- identifier, des modèles réactionnels et extraire des règles générales pour leur application à différents types de nano-objets ;
- capitaliser sur les opportunités offertes par les techniques de caractérisation de pointe pour le suivi in situ et ex situ de la formation des nanostructures et l'étude de leurs propriétés ;
- adapter des techniques de caractérisation usuelles aux conditions des réactions de formation et à l'environnement applicatif des nanostructures ;
- discuter des cahiers des charges des différentes applications et l'adaptation requise des propriétés des nano-objets ;
- présenter des processus d'intégration de nano-objets individuels dans des dispositifs fonctionnels (organisation en super-réseaux, création d'interfaces, packaging) ;

- se préoccuper de la toxicité des nano-objets et, le cas échéant, explorer les moyens de l'atténuer ;
- réduire le coût de la synthèse et son impact environnemental en réfléchissant notamment au cycle de vie et au recyclage des nano-objets ;
- mieux appréhender et utiliser le potentiel des outils théoriques interprétatifs et prédictifs pour comprendre les mécanismes de formation de nano-objets et mettre au point des guides pour la conception de nano-objets aux propriétés sur-mesure ;
- identifier et évaluer les opportunités offertes par les simulations numériques et l'intelligence artificielle dans la prédiction des propriétés, la conception, et in fine la détermination des paramètres optimaux pour l'élaboration de nano-objets.

### CONTACTS

Directrice  
**Isabelle Lisiecki (MONARIS, Paris)**  
[Isabelle.lisiecki@sorbonne-universite.fr](mailto:Isabelle.lisiecki@sorbonne-universite.fr)

Directrice adjointe  
**Katerina Soulantika (LPCNO, Toulouse)**  
[ksoulant@insa-toulouse](mailto:ksoulant@insa-toulouse)

[gdr-nino.cnrs.fr](http://gdr-nino.cnrs.fr)

**GDR** Groupement  
de recherche  
**GDR «NINO» Nanostructures  
inorganiques par chimie en solution**

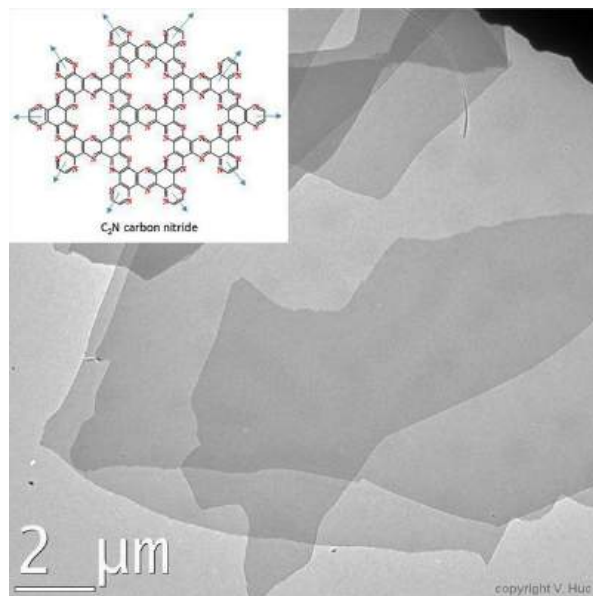
# GDR NEMO

## New Molecular Electronics

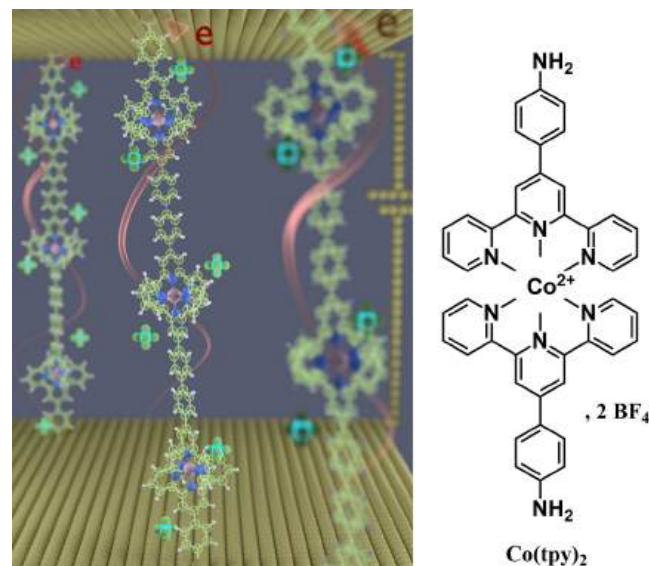
**120** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **30** laboratoires

## OBJECTIFS

L'objectif du GDR est de fédérer la communauté française gravitant autour de l'Electronique Moléculaire et provenant de différents domaines, tels que les chimistes de synthèse, les électrochimistes, les microscopistes (STM, AFM), les physiciens, les ingénieurs et électroniciens ou encore les théoriciens et numériciens. Autour de 4 thématiques principales, il a pour mission de promouvoir et d'animer cette communauté afin de favoriser l'avancée des connaissances et permettre le développement d'approches innovantes. Il vise à valoriser les activités de recherche des équipes impliquées à travers une cartographie nationale et en assurer le rayonnement à l'échelle nationale et internationale.



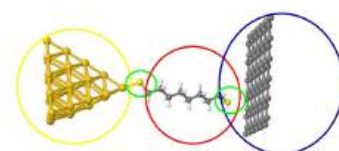
Synthèse de matéri aux multi-feuillets C2N.  
© Vincent Huc



Jonction moléculaire à base de composés organométalliques.  
© Pascal Martin

## THÉMATIQUES

- Jonctions à molécule unique, mémoires et switches.
- Jonctions à large échelle, mémoires et switches.
- Matériaux et ingénierie moléculaire.
- Techniques de caractérisation, de mesure et méthodes théoriques et numériques pour l'électronique moléculaire



$$I = \frac{4\pi e^2}{h} \int_{E_F}^{E_F+eV} \text{Tr}[T_{TS} \rho_{SS}(E) D_{SS}'(E) T_{ST} \rho_{TT}(E - eV) D_{TT}'(E - eV)] dE.$$

Modélisation d'une jonction moléculaire.  
© Yannick Dappe

## PROSPECTIVES

Face au besoin croissant de stockage, les recherches sur les technologies émergentes pour l'électronique de demain sont cruciales. Dans ce contexte, l'électronique moléculaire est un domaine en plein essor et qui concerne l'étude des propriétés de transport de charge, de spin, de chaleur à travers des systèmes dont les unités de base sont des molécules individuelles ou leurs assemblages jusqu'à la couche d'épaisseur nanométrique de molécules ou de polymères organiques. De nombreuses questions fondamentales et appliquées se posent et sont toujours d'actualité dans ce domaine : comment un courant électronique traverse-t-il une molécule ou un matériau organique ? Est-ce qu'une molécule peut reproduire le comportement d'un composant microélectronique standard ou même apporter de nouvelles fonctionnalités ? Comment peut-on incorporer/connecter une molécule unique dans un dispositif ? Comment interconnecter des composants moléculaires et les intégrer dans des architectures complexes ?

Pour répondre à ces questions, plusieurs actions sont identifiées.

**FAIRE ÉMERGER DE NOUVEAUX MATÉRIAUX GRACE À L'INGÉNIERIE MOLÉCULAIRE** pour les systèmes de jonctions moléculaires : la synthèse de nouvelles molécules, le couplage des molécules à différents types d'électrodes (matériaux 2D) pour mettre en lumière de nouvelles fonctions électroniques. Cela inclut les études théoriques et les développements méthodologiques pour mieux comprendre les mécanismes associés. De plus, le couplage molécule/matériau 2D peut générer des nouvelles structures hybrides aux propriétés (transport de charge, spin, chaleur) complètement bouleversées.

**MIEUX COMPRENDRE À DIFFÉRENTES ÉCHELLES LES MÉCANISMES DE TRANSPORT** grâce à des outils de plus en plus performants. Principalement deux technologies sont traitées :

- l'approche « molécule unique » comprenant la caractérisation électronique et morphologique à l'échelle du

nanomètre et la manipulation des molécules uniques, magnétorésistance par STM en ultra-vide, à basse température et sous champ magnétique ;

- l'approche « large échelle » incluant le développement des techniques de lithographie permettant d'accroître considérablement la précision, la reproductibilité et la fiabilité des résultats obtenus.

**DÉVELOPPER DE NOUVELLES PERSPECTIVES D'APPLICATIONS** de ces matériaux dans des domaines d'actualité : les mémoires moléculaires, la spintronique moléculaire en contrôlant le transport du spin dans ces systèmes moléculaires, ou encore le domaine des technologies quantiques.

## CONTACTS

Directeur  
**Pascal Martin, (ITODYS, Paris)**  
[pascal.martin@u-paris.fr](mailto:pascal.martin@u-paris.fr)

Directeur adjoint  
**Yannick Dappe, (SPEC, Paris-Saclay)**  
[yannick.dappe@cea.fr](mailto:yannick.dappe@cea.fr)

<https://nemo.cnrs.fr>

**GDR** Groupement  
de recherche  
**NEMO** New Molecular Electronics

# GDR PES

## Photo-Électrostimulation

200 chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de 49 laboratoires

### OBJECTIFS

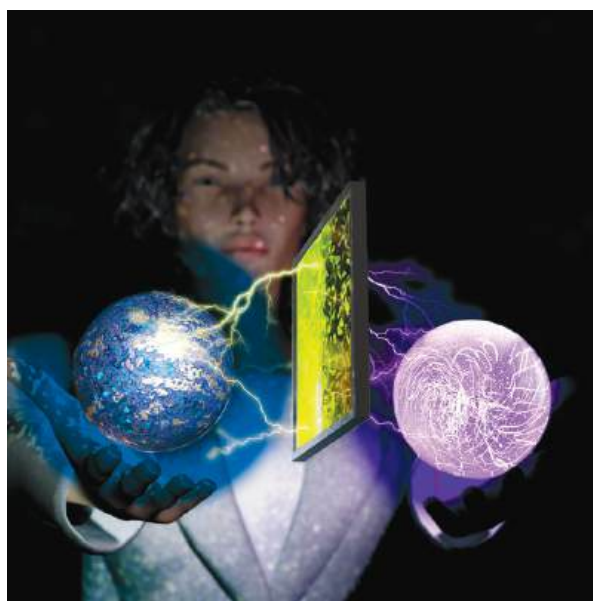


Image illustrant un concept d'électroluminescence photoinduite à des anodes de BiVO4

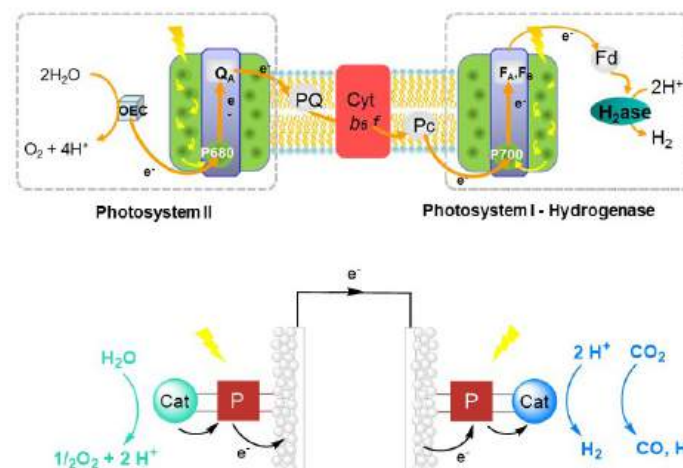
© courtesy of Jean-François Bergamini

Les objectifs du GDR PES sont de :

- constituer une communauté autour de la thématique photo-électrostimulation, c'est-à-dire l'ensemble des phénomènes dans lesquels l'action conjointe des électrons et des photons peut induire une modification contrôlée d'un système moléculaire ou d'un (nano) matériau et donc in fine de ses propriétés. La modification peut être structurale ou de composition ;
- fédérer autour de ce thème différentes communautés scientifiques (photochimistes, électrochimistes, théoriciens) ayant peu l'occasion d'interagir dans des manifestations scientifiques, et d'autres intéressées par les matériaux moléculaires et leurs propriétés ;
- organiser des rencontres sous forme de colloques, journées, ateliers, écoles thématiques traitant soit de la problématique dans son ensemble, soit d'aspects plus spécifiques (instrumentation, modélisation, synthèse...) ;
- faire émerger de nouvelles collaborations.

### THÉMATIQUES

- Synthèse de nouvelles molécules photo- et/ou électro-stimulables
- Conception et caractérisation de (nano)matériaux moléculaires photo- et/ou électro-stimulables
- Modélisation des processus induits dans la photo-électrostimulation
- Nouvelles plateformes instrumentales couplant photochimie et électrochimie



Exemple de cellule photoélectrochimique bioinspirée pour la production d'hydrogène.

© LCBM, CEA Grenoble

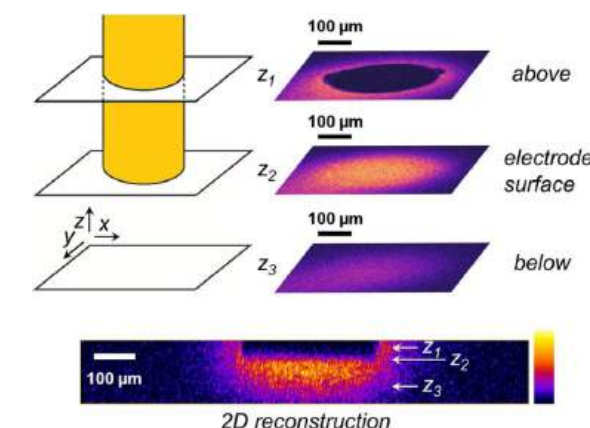
### PROSPECTIVES

#### CONTEXTE SCIENTIFIQUE

De nombreuses problématiques actuelles mettent en jeu la synergie entre photochimie et électrochimie, notamment dans le stockage et la production d'énergie verte (production d'hydrogène, cellules photovoltaïques couplées à des batteries ou alimentant des électrolyseurs...), la détection et le traitement des polluants (photoréduction du CO<sub>2</sub> ou photooxydation de molécules toxiques). Il existe donc des domaines d'application à fort enjeu sociétal et économique où des compétences complémentaires dans ces deux disciplines s'avèrent indispensables, bien qu'elles aient été peu croisées jusqu'alors. En outre, la résolution de problèmes complexes, comme ceux faisant intervenir des mécanismes cellulaires en biologie ou le vieillissement des matériaux de batteries, et permettant l'émergence de nouveaux concepts, nécessite le couplage de techniques d'analyse in situ et la fourniture d'informations in operando. La mise en place de ces couplages requiert une forte expertise pour contourner les verrous technologiques et/ou scientifiques. Le GDR PES se propose précisément de donner à ses membres le cadre d'échanges, de rencontres et de formation permettant d'acquérir l'ensemble de ces compétences à la fois théoriques et expérimentales. Le groupement entend aussi favoriser le développement de nouveaux matériaux moléculaires ou nanomatériaux photo- et électrostimulables pour le stockage de l'information, l'activation contrôlée de réactions chimiques ou encore l'exaltation de propriétés existantes voire la génération de nouvelles, comme dans les métamatériaux.

#### VOLET FORMATION

Un accent important est mis sur la formation de ses membres, en particulier via l'organisation d'une école thématique. Les communications scientifiques sont très largement ouvertes aux jeunes chercheuses et chercheurs (doctorants, post-doctorants, jeunes permanents) dans les colloques organisés par le GDR. Les échanges entre laboratoires partenaires du réseau sont financièrement soutenus pour permettre d'élargir le socle de compétences des doctorants.e.s et des jeunes chercheurs. Des journées scientifiques inter-GDR permettront également



Profils d'intensité de fluorescence à différentes distances d'une électrode obtenus par microscopie confocale.

© Laurent Bouffier  
© 2016 American Chemical Society.

d'étendre la pluridisciplinarité autour de problématiques communes mais vues et analysées avec des approches différentes.

#### VOLET INTERNATIONAL

Le GDR encourage les interactions avec les réseaux collaboratifs internationaux se situant dans son périmètre, comme l'IRP (International Research Project) Nanosynergetics (Japon), en les associant à des manifestations scientifiques ou à des dispositifs de formation.

#### CONTACTS

Directeur  
**Fabien Miomandre (PPSM, Gif-sur-Yvette)**  
[mioman@ens-paris-saclay.fr](mailto:mioman@ens-paris-saclay.fr)

Directeur adjoint  
**Stéphane Rigaut (ISCR, Rennes)**  
[stephane.rigaut@univ-rennes.fr](mailto:stephane.rigaut@univ-rennes.fr)

[www.gdrpes2.com](http://www.gdrpes2.com)

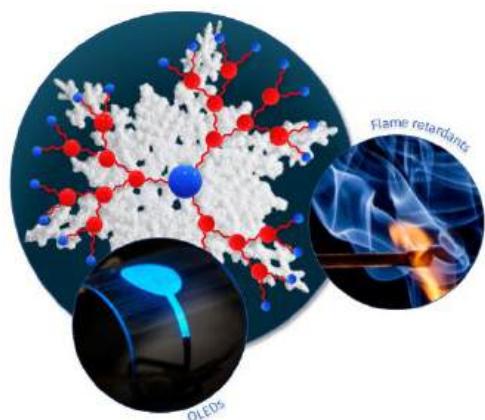
**GDR** Groupement de recherche  
**PES** Photo-Électro stimulation

# GDR PHOSPHORE

46 chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de 32 laboratoires

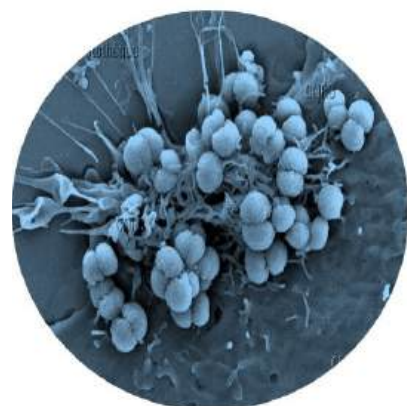
## OBJECTIFS

Parmi les éléments de la classification périodique, le phosphore occupe une place essentielle en tant que lien entre le monde du vivant et du non vivant, dans les cycles de la matière organique et inorganique de notre biosphère. On retrouve ce rôle multiple de l'élément phosphore dans la chimie développée par l'homme et les applications des molécules phosphorées s'étendent aujourd'hui des domaines des matériaux, des nanotechnologies et de la catalyse jusqu'aux sciences de la vie. Cette multiplicité de



De la molécule aux matériaux de fonctions.

© Marc Lecouvey, Sorbonne Paris-Nord - David Virieux, ENSCM Montpellier



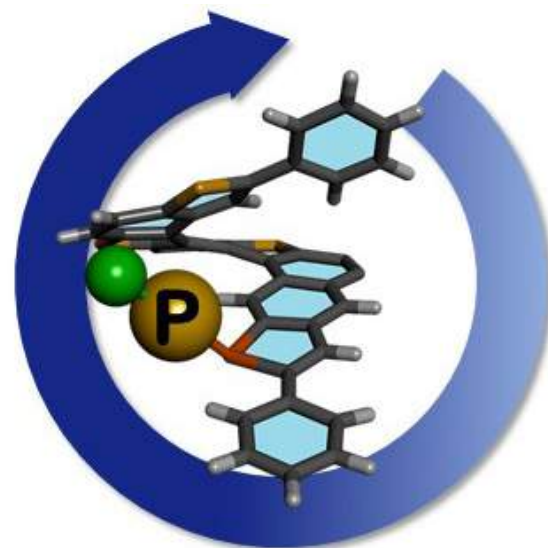
Cellules cancéreuses HeLa traitées à la Rapamycine pendant deux heures observées en microscopie à illumination structurée.

© Franck Lafont, Nicolas Barrois, CMPI-CIIL/CNRS/CNRS Images

domaines et d'applications est couverte par les équipes du GDR PHOSPHORE.

Les objectifs du GDR sont :

- contribuer à l'émergence, au niveau national, d'un pôle d'experts en chimie des molécules phosphorées ;
- aider au développement des compétences, encourager l'émergence de nouvelles thématiques ;
- organiser et encourager les rencontres scientifiques et les actions de formation ;
- faciliter la diffusion des connaissances scientifiques vers l'industrie et le grand public ;
- contribuer à la formation des futurs chercheurs et entrepreneurs du domaine.



Catalyse : vers une chimie plus efficace et verte.

© CNRS Images

## THÉMATIQUES

- Nanosciences et sciences des matériaux
- Catalyse - méthodologies et applications
- Molécules bioactives et applications

## PROSPECTIVES

L'objectif du GDR est de fédérer les équipes françaises travaillant dans la chimie du phosphore et impliquées dans la compréhension des corrélations structure-propriétés, vers des applications en sciences des matériaux, catalyse, agrochimie et chimie médicinale. Si le cœur de ce GDR est centré sur la chimie, sa nature interdisciplinaire permet d'envisager des avancées essentielles dans les domaines de la physique, des sciences de l'ingénieur et des biosciences, en réponse à des enjeux économiques et sociétaux majeurs. Ce GDR vise en même temps le partage de connaissances, de savoir-faire, d'équipements et de techniques pour accroître la visibilité du domaine dans la communauté scientifique. Le GDR est structuré en trois axes scientifiques.

### NANOSCIENCES ET SCIENCES DES MATÉRIAUX

La conception et la synthèse de matériaux multifonctionnels, peu coûteux et respectueux de l'environnement sont d'une grande importance car ils trouvent leurs applications dans presque tous les aspects de la vie quotidienne. L'insertion d'hétéroatomes dans les matériaux fonctionnels permet de diversifier les propriétés ou générer de nouveaux assemblages. Les équipes du GDR utilisent la chimie du phosphore pour le développement de précurseurs moléculaires inorganiques, organiques et organométalliques pour la synthèse de matériaux avancés à propriétés définies (électronique, optique, magnétique, mécanique...). Par exemple, il a été démontré que des polymères inorganiques à base de phosphore sont des agents ignifugeants pour les textiles très efficaces. De plus, l'insertion d'atomes de phosphore dans des oligomères ou des polymères pi-conjugués a également permis de développer des émetteurs de lumière et des colorants pouvant être incorporés dans des diodes électroluminescentes et des cellules solaires. Dans le domaine de l'environnement, les dérivés phosphorés jouent un rôle important pour la purification de l'eau.

### CATALYSE, MÉTHODOLOGIES ET APPLICATIONS SYNTHÉTIQUES

La catalyse est aujourd'hui une technologie incontournable pour le développement de procédés éco-compa-

tibles, la production industrielle de matières premières et de produits à haute valeur ajoutée, dont notamment les composés bioactifs. À cet égard, elle représente un enjeu économique et sociétal majeur. Dans le domaine de la catalyse homogène, les ligands organophosphorés occupent une place dominante parmi les hétéroéléments. Les équipes du GDR développent des organocatalyseurs phosphorés et des ligands organométalliques, ainsi que l'étude de leurs propriétés, en privilégiant les designs structuraux inédits et les applications catalytiques en termes de contrôle de réactivité et de stéréosélectivité.

### MOLÉCULES BIOACTIVES ET APPLICATIONS

Dans le monde du vivant, le phosphore est un élément majeur puisqu'il sert en particulier de lien structurant entre les différentes bases de l'ADN sous forme de phosphate. Les phosphonates sont des mimes des phosphates, où le remplacement d'un oxygène par un atome de carbone permet d'accéder à des composés ayant une stabilité métabolique accrue. De nombreux agents thérapeutiques possèdent une fonction phosphonate, comme par exemple des antiviraux ou des antibiotiques, mais aussi des anti-cancéreux et des agents contre les maladies parasitaires ou osseuses. Les équipes du GDR sont impliquées dans la recherche de nouvelles approches thérapeutiques faisant appel à des composés phosphorés pour le traitement du cancer ou de maladies inflammatoires.

## CONTACTS

Directrice  
**Murielle Hissler (ISCR, Rennes)**  
[murielle.hissler@univ-rennes.fr](mailto:murielle.hissler@univ-rennes.fr)

<https://gdrphosphore.sciencesconf.org>

**GDR** Groupement  
de recherche  
**PHOSPHORE**

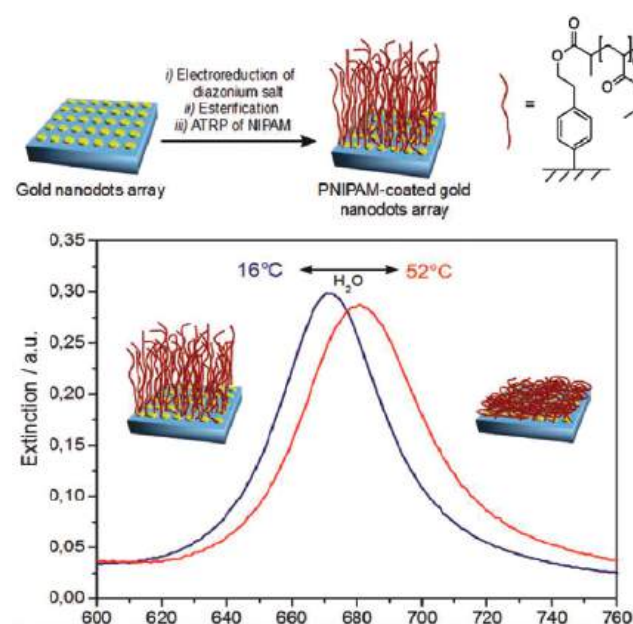
# GDR PLASMONIQUE ACTIVE

**150** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **20** laboratoires

## OBJECTIFS

La plasmonique est un vaste champ d'étude scientifique et technologique exploitant l'interaction lumière/matière, avec de nombreuses applications dans l'énergie, la nano-médecine, l'environnement, les spectroscopies exaltées, la nano-optique, les capteurs, l'art... Dans ce contexte, le GDR PLASMONIQUE ACTIVE anime sa communauté scientifique à travers deux approches complémentaires :

- soit une modification des propriétés physiques et chimiques de molécules via l'excitation des plasmons de surface ;
- soit le contrôle des propriétés optiques par l'intermédiaire d'un environnement local ou de molécules stimulables.



Spectres d'extinction d'un système hybride particules d'or/polymère thermosensible, en fonction de la température.

© Nordin Felidj, ITODYS/Université Paris-Diderot  
© 2011, American Chemical Society

## THÉMATIQUES

- Plasmonique accordable
- Plasmonique et réactions chimiques
- Plasmonique et transformations physiques
- Vers des dispositifs plasmoniques intégrés

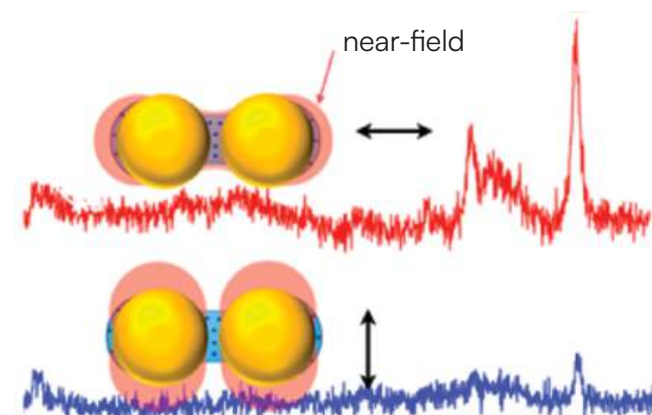
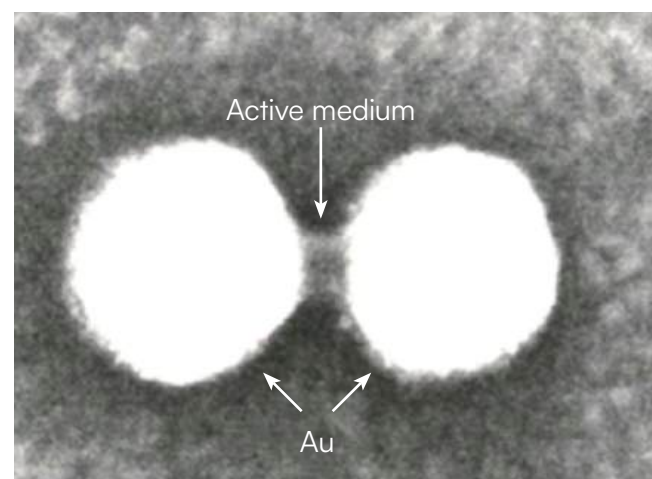


Schéma et image MEB d'un dimère hybride de nanoparticules d'or.

© Renaud Bachelot, LNIIO/Université de Troyes  
© 2015, American Chemical Society

## PROSPECTIVES

En vue de structurer les actions et les missions du GDR, de définir plus précisément leurs contours, les thématiques scientifiques d'intérêt seront réparties selon les quatre axes majeurs suivants.

### PLASMONIQUE ACCORDABLE

L'objectif est la modulation et le contrôle des propriétés optiques de structures plasmoniques hybrides, de façon réversible. Nous nous intéresserons à l'accordabilité des propriétés plasmoniques par l'intermédiaire d'un milieu diélectrique actif (inorganique, organique, solvants, molécules...), ou d'un couplage plasmonique (cœur/coquille, dimères de nanoparticules —NPs—, ou couplage entre NPs et un substrat métallique...). Nous nous intéresserons également à l'auto-accordabilité (via l'injection d'électrons).

### PLASMONIQUE ET RÉACTIONS CHIMIQUES

Cet axe de recherche sera consacré à l'induction de transformations chimiques par l'intermédiaire de l'excitation plasmon. Parmi les transformations envisagées, on s'intéressera notamment aux réactions de réduction chimique, à la fonctionnalisation de surface, aux modifications structurales, à la polymérisation, à la catalyse.

### PLASMONIQUE ET TRANSFORMATIONS PHYSIQUES

La plasmonique inductive permet également d'induire et de contrôler des effets physiques. Le GDR s'intéressera à des phénomènes thermiquement activés (thermoplasmoniques), des effets optiquement activés (effet photoélectrique, optique non linéaire, photovoltaïque...), mais aussi acoustiques (génération de phonons induits par excitation plasmon). Les effets électroniques liés à la génération d'électrons dits "chauds", souvent à l'origine de ces transformations physiques (mais aussi chimiques), seront également un aspect important abordé. Il s'agira de s'intéresser aux mécanismes liés à cet effet, peu développés sur le plan expérimental.

### VERS DES DISPOSITIFS PLASMONIQUES INTÉGRÉS

Cet axe concernera la conception et la réalisation de dispositifs submicroniques divers, toujours plus performants, combinés à l'ingénierie plasmonique. Nous nous intéresserons ainsi à des composants de type capteurs plasmoniques actifs (incluant les techniques SPR — surface plasmon resonance —, les spectroscopies exaltées comme la fluorescence, la spectroscopie infra-rouge et la diffusion Raman), des dispositifs intégrés actifs (optiques, thermiques, électroniques...).

En termes de répercussions, on peut envisager le développement de systèmes de transduction, assurant une conversion ou un transfert de signaux (optique, acoustique...) en un signal de nature électrique, ce qui représente un enjeu sociétal majeur par exemple dans le domaine de l'énergie, la médecine, l'environnement.

À travers les quatre axes proposés, le GDR souhaite franchir des étapes importantes sur la compréhension de phénomènes photo-induits de transferts d'électrons chauds entre systèmes organiques et inorganiques.

### CONTACTS

Directeur  
**Nordin Felidj (ITODYS, Paris)**  
[nordin.felidj@u-paris.fr](mailto:nordin.felidj@u-paris.fr)

Directeur adjoint  
**Marc Lamy de la Chapelle (IMMM, Le Mans)**  
[marc.lamydelachapelle@univ-lemans.fr](mailto:marc.lamydelachapelle@univ-lemans.fr)

<https://www.gdr-plasmonique-active.fr/>

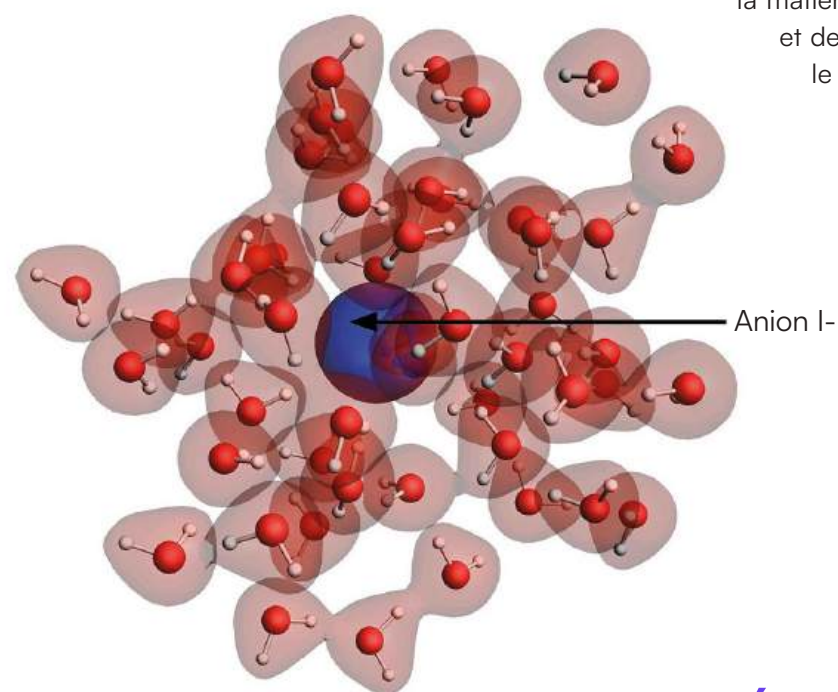
**GDR** Groupement  
de recherche  
**Plasmonique active**

# GDR NBODY

## Problème quantique à N corps en chimie et physique

**100** chercheuses et chercheurs impliqués au sein de **37** laboratoires

### OBJECTIFS



Le GDR NBODY a pour objectif de rassembler la communauté travaillant sur le problème quantique à N corps, en majorité du point de vue de la chimie quantique, mais en intégrant aussi les points de vue de la physique de la matière condensée, de la physique nucléaire, et des mathématiques. L'idée est de favoriser le développement de nouvelles méthodes de calculs en mécanique quantique, le transfert de ces méthodes d'une discipline à une autre, et leur mise en œuvre informatique efficace. Pour cela, le Groupement de recherche organise des congrès et ateliers interdisciplinaires. Il est particulièrement impliqué dans la formation des étudiants et des chercheurs via l'organisation de plusieurs écoles interdisciplinaires internationales.

### THÉMATIQUES

- Chimie quantique
- Physique de la matière condensée
- Physique nucléaire
- Mathématiques

#### Calcul quantique du système I-(H<sub>2</sub>O)<sub>50</sub>

© André Severo Peireira Gomes, communiqué de presse CNRS Physique

$$E_{c,J}^w[n^w] = \mathcal{E}_{c,J}^w[n^w] + \sum_{K \geq 0} w_K \sum_{I > 0} (\delta_{IJ} - w_I) \frac{\partial (\mathcal{E}_{c,K}^w[n^w])}{\partial w_I} + \sum_{K \geq 0} w_K \int d\mathbf{r} \frac{\delta \mathcal{E}_{c,K}^w[n^w]}{\delta n(\mathbf{r})} (n_{\Phi_{f,K}^w}(\mathbf{r}) - n_{\Psi_f}(\mathbf{r}))$$

#### Développement d'une théorie de la fonctionnelle de la densité pour les états excités.

© Emmanuel Fromager, Université de Strasbourg

### PROSPECTIVES

Nous assistons à une évolution remarquable de la chimie quantique au niveau international. De nouvelles approches basées sur des méthodes provenant d'horizons différents sont proposées. C'est le cas par exemple pour les méthodes basées sur la fonction d'onde où de nouvelles approches permettant de dépasser les limites des méthodes actuelles sont développées. Par exemple, des calculs CASSCF où des espaces actifs correspondant à une cinquantaine d'électrons dans une cinquantaine d'orbitales peuvent maintenant être réalisés. De nouvelles représentations de la fonction d'onde issues de la physique (Tensor Network) sont utilisées et fournissent une vision beaucoup plus profonde du contenu physique de la fonction d'onde. Le développement des approches stochastiques est aussi très actif. Par exemple, la méthode FCI-QMC introduite il y a quelques années permet d'échantillonner des espaces actifs inaccessibles jusque-là. Le développement de variantes déterministes des méthodes FCI-QMC, telle que l'interaction de configurations sélectionnée, est également un domaine de recherche très actif. Il faut noter que pour toutes ces méthodes la partie HPC devient maintenant essentielle. Des implémentations très efficaces adaptées à l'architecture des supercalculateurs actuels, en particulier en ce qui concerne le parallélisme massif, doivent être développées. Dans le cas de calculs systématiques de nombreux systèmes moléculaires on assiste à une explosion spectaculaire des techniques de machine learning. À un niveau plus fondamental, il est maintenant proposé d'utiliser le machine learning pour le choix des configurations importantes dans les calculs d'interaction de configurations.

Au-delà des méthodes de fonction d'onde, il faut également citer l'évolution des techniques de fonction de Green, un outil central des physiciens, et leur application à la chimie quantique qui se développe. Dans le même esprit, on peut aussi mentionner les méthodes d'embedding qui incluent l'effet de l'environnement à la manière des méthodes DMFT. Du côté de la DFT, on peut citer



Supercalculateur CURIE.

© Cyril Fréillon, CNRS Images

la combinaison des méthodes de fonction d'onde avec des fonctionnelles de la densité de courte portée afin de corriger les effets de bases incomplètes et inclure la corrélation dynamique à faible coût calculatoire.

Cette effervescence autour des méthodes de calcul ab initio nécessite de mobiliser des méthodologies variées et encore peu connues de tous. Le GDR NBODY a pour mission de structurer ces développements grâce à une interaction renforcée entre chimistes, physiciens et mathématiciens.

### CONTACTS

Directeur  
**Julien Toulouse (LCT, Paris)**  
[toulouse@lct.jussieu.fr](mailto:toulouse@lct.jussieu.fr)

[wiki.lct.jussieu.fr/gdrnbody](http://wiki.lct.jussieu.fr/gdrnbody)

**GDR** Groupement de recherche  
**NBODY** Problème quantique à N corps en chimie et physique

# GDR PROMÉTHÉE

Procédés hydrométallurgiques pour la gestion intégrée des ressources primaires et secondaires

140 chercheuses et chercheurs impliqués au sein de 27 laboratoires

## OBJECTIFS

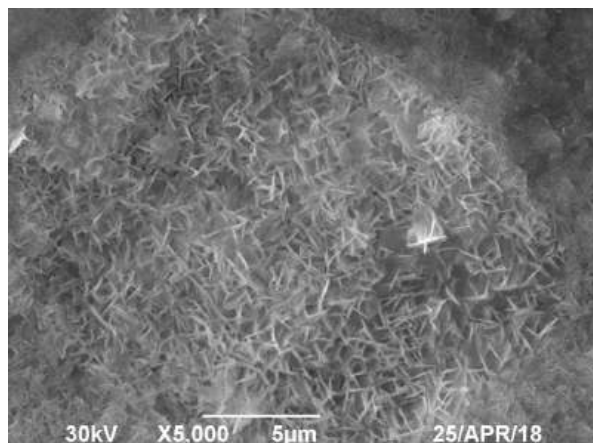


Image au microscope électronique à balayage de l' $\alpha\text{-Co(OH)}_2$   
© M. Le Page, Mostefa/LRGP/ENSIC

Depuis plusieurs décennies, les besoins en matières premières minérales sont en constante augmentation. Certains métaux dits "stratégiques" présentent des risques d'approvisionnement susceptibles d'impacter fortement les secteurs industriels français et européens.

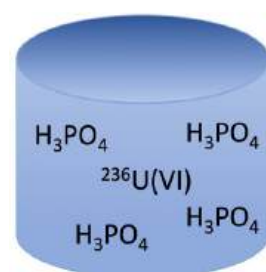
Ainsi, le développement de procédés hydrométallurgiques performants, innovants et compétitifs, visant à extraire ces éléments à partir de ressources pauvres ou complexes, issues de mines primaires ou du recyclage, devient une nécessité. Le GDR Prométhée a pour objectif de poursuivre la structuration, le développement et l'intégration de la recherche en hydrométallurgie dans son environnement.

## THÉMATIQUES

- Modélisation thermodynamique et physico-chimie des procédés hydrométallurgiques
- Développement de procédés nouveaux et/ou en rupture technologique
- Intégration dans son environnement
- Recyclage et économie circulaire



Réacteur expérimental.  
© avec courtoisie Frédéric Maligne, CNRS



Récupération de l'uranium contenu dans l'acide phosphorique concentré par extraction liquide-liquide.

© Marie Le Page Mostefa/LRGP/ENSIC

## PROSPECTIVES

L'hydrométallurgie se trouve actuellement face à de nombreux défis liés :

- aux difficultés d'approvisionnement pour certains métaux ;
- à la nécessité d'exploiter de nouveaux gisements (flux secondaires, déchets urbains...) ;
- aux besoins de techniques plus efficaces et plus respectueuses de l'environnement.

Ainsi, le GDR Prométhée a pour objectif de faire émerger de nouvelles voies d'extraction répondant aux enjeux actuels et futurs, grâce à la synergie de trois axes de recherche complémentaires.

### COMMENT ÉLABORER DES MODÈLES FIABLES POUR COMPRENDRE ET OPTIMISER LES PROCÉDÉS ?

Outil particulièrement puissant pour appuyer la compréhension, la mise en œuvre et l'optimisation de tout procédé, la modélisation thermodynamique et physicochimique en hydrométallurgie reste complexe, car elle repose sur la description de systèmes dans lesquels de nombreuses réactions peuvent prendre place, avec parfois des données peu disponibles, voire inexistantes. De nombreux défis restent à relever pour aboutir à une description fine des phases solides (résines, précipités, crasses, colloïdes) et des phases liquides concentrées (phases aqueuses, phases organiques, liquides ioniques), ainsi que des transferts de matière aux interfaces.

### COMMENT INNOVER, INTENSIFIER ET PROPOSER DES PROCÉDÉS EN RUPTURE ?

De nombreux challenges et verrous technologiques persistent dans la chimie et la physicochimie associées aux procédés hydrométallurgiques et plus particulièrement dans les procédés de lixiviation ainsi que dans les procédés de séparation et de purification. En effet, ces procédés sont plus complexes dans le cas d'utilisation de ressources primaires appauvries (faible teneur en métaux) et du recyclage (complexité de matières polyphasiques). Les compétences des membres du GDR seront un atout pour mieux comprendre les phénomènes physiques et

chimiques qui prennent place dans ces procédés en vue de les intensifier, les rendre moins énergivores et les adapter à de nouvelles sources de matières premières.

### COMMENT INTÉGRER LA RECHERCHE EN HYDROMÉTALLURGIE DANS UN ENVIRONNEMENT ÉCONOMIQUE, SOCIÉTAL, INDUSTRIEL ET ÉCOLOGIQUE ?

Le développement des procédés hydrométallurgiques a pour but de permettre l'extraction et la récupération de métaux, en particulier les métaux stratégiques et/ou critiques, dont nos sociétés dépendent de manière vitale. Le rôle du GDR donne une vision plus globale en :

- intégrant les aspects relatifs à "l'économie circulaire" et l'environnement socio-économique de par l'implication des laboratoires en sciences humaines et sociales ;
- communiquant vers la société civile, consommatrice de ressources minérales et élément incontournable de la chaîne du recyclage au travers de la collecte ;
- intensifiant et développant les échanges et projets collaboratifs avec les industriels, directement concernés par les enjeux liés à l'approvisionnement en ressources minérales.

## CONTACTS

Directeur  
**Laurent Cassayre (LGC, Toulouse)**  
[laurent.cassayre@ensiacet.fr](mailto:laurent.cassayre@ensiacet.fr)

Directeur adjoint  
**Hervé Muhr (LRGP, Nancy)**  
[hervé.muhr@univ-lorraine.fr](mailto:hervé.muhr@univ-lorraine.fr)

<https://gdr-promethee.cnrs.fr>  
<https://www.linkedin.com/groups/13955197/>

**GDR** Groupement de recherche  
**Prométhée** Procédés hydrométallurgiques pour la gestion intégrée des ressources primaires et secondaires

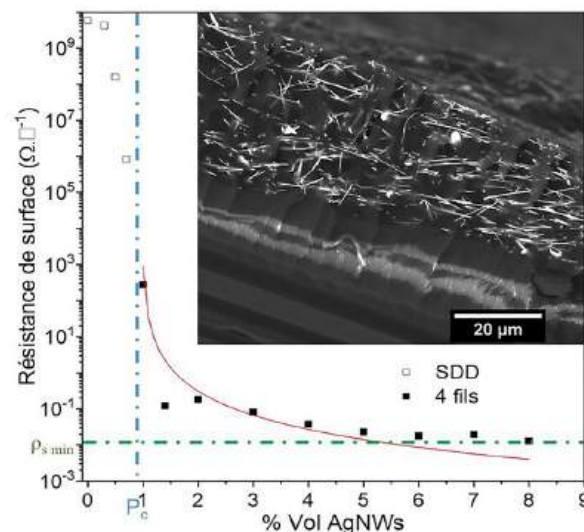
# GDR REEPOS

## Relations structures/propriétés électriques dans les polymères & composites

80 chercheuses et chercheurs impliqués au sein de 28 laboratoires

### OBJECTIFS

Ce GDR a pour but de fédérer les équipes provenant de différentes communautés et instituts (CNRS Chimie et CNRS Ingénierie), de favoriser les échanges entre elles afin d'étudier et d'établir des relations structure/propriétés dans les matériaux polymères à l'aide de mesures électriques. En ce sens, 3 thèmes scientifiques seront développés afin de couvrir différentes propriétés et outils de caractérisations électriques. Bien évidemment, ces thèmes pourront évoluer au cours du temps en fonction des besoins exprimés par ses participants.

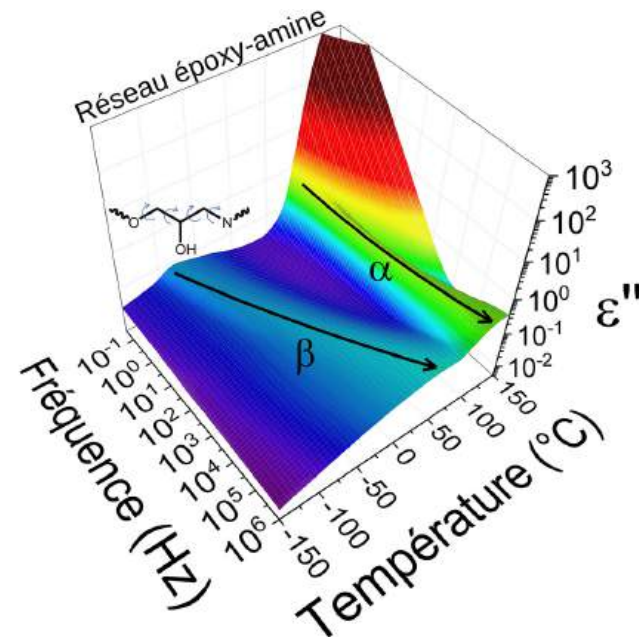


Mesures de conductivité électrique dans les composites à l'aide de différentes techniques

© GdR Reepos

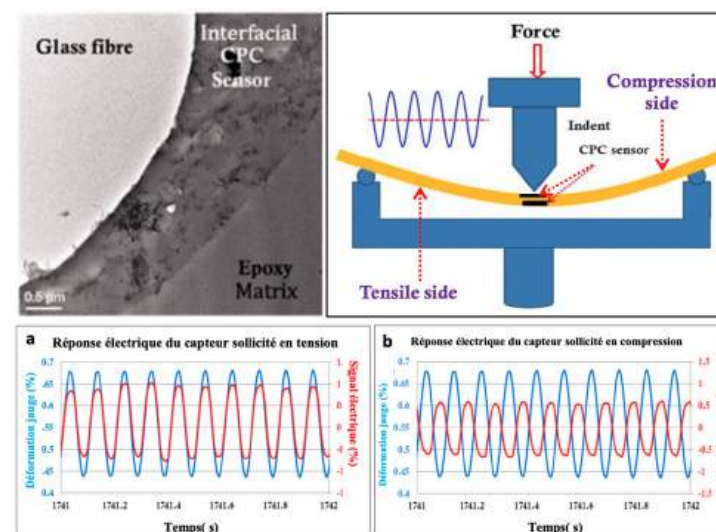
### THÉMATIQUES

- Transport de charge électronique/ionique
- Dynamique relaxationnelle large bande
- Couplage de propriétés (électrique/mécanique, magnétique/électrique, électrique/thermique...)



Carte 3D obtenue par spectroscopie diélectrique permettant d'étudier la mobilité moléculaire des polymères

@ GdR Reepos



Mesures couplées mécanique-électrique sur des nanocomposites conducteurs

@ GdR Reepos

### PROSPECTIVES

La volonté pour ce Groupement de Recherche est de pouvoir réunir les chercheurs appartenant principalement à deux instituts du CNRS : CNRS Chimie et CNRS Ingénierie afin de leur permettre d'échanger leurs analyses et de partager leurs techniques de caractérisations. Ce besoin d'échanges à l'échelle nationale avait été exprimé lors des deux congrès nationaux sur spectroscopie diélectrique des matériaux polymères SDM (Rouen en 2017 et Lyon en 2019) ainsi qu'au cours de l'action Convergence du CNRS sur les relations structure/propriétés dans les matériaux polymères. La mesure électrique permet bien évidemment d'évaluer la propriété de conduction électrique associée à différentes applications : isolation électrique, protection antistatique, stockage et conversion de l'énergie, etc. Cette mesure électrique offre également la possibilité de sonder le matériau polymère à l'échelle locale ou méso (caractérisations multi-échelles) et ainsi obtenir des informations précieuses sur l'architecture du matériau via la dynamique moléculaire afin d'établir des relations structure/propriétés. La spectroscopie d'impédance ou diélectrique large bande (dynamique moléculaire) peut être un bon outil pour étudier l'interface ou l'interphase entre la phase amorphe et une phase cristalline, une matrice polymère et une charge inorganique/organique introduite dans la matrice (amenant aux composites) ou encore avec un substrat et même aller au-delà avec l'étude du vieillissement et de la durabilité des matériaux polymères.

La structuration de cette communauté permettra de favoriser les échanges entre équipes de recherche autour de ces techniques de caractérisations et ainsi mettre en lumière l'investissement en temps réalisé pour le développement d'outils d'analyse spécifiques mis à disposition de l'ensemble des chercheurs. Ces outils se révèlent extrêmement intéressants pour établir des relations structure/propriétés des matériaux polymères.

Un autre objectif de ce GDR serait de pouvoir proposer un cadre pour mettre en place des collaborations entre équipes ayant les mêmes compétences ou des compétences complémentaires dans le but d'accélérer

les avancées sur une thématique autour des propriétés électriques.

Dans chaque thème, une attention particulière sera apportée à l'instrumentation et la mesure. Cette problématique sera transversale à l'ensemble des thèmes et sera d'autant plus importante dans le cadre de couplages entre propriétés (matériaux multifonctionnels, propriétés couplées ou matériaux soumis à plusieurs stimulations). Le thème 3 est donc par nature transversal aux deux premiers thèmes.

### CONTACTS

Directeur  
**Sébastien Pruvost (IMP, Lyon)**  
[sebastien.pruvost@insa-lyon.fr](mailto:sebastien.pruvost@insa-lyon.fr)

Directeur adjoint  
**Éric Dantras (CIRIMAT, Toulouse)**  
[eric.dantras@univ-tlse3.fr](mailto:eric.dantras@univ-tlse3.fr)

<https://gdr-reepos.cnrs.fr/>

**GDR** Groupement de recherche  
**REEPOS Relations**  
structures/propriétés électriques dans les polymères & composites

# GDR RAFALD

## Réseau des acteurs français de l'ALD

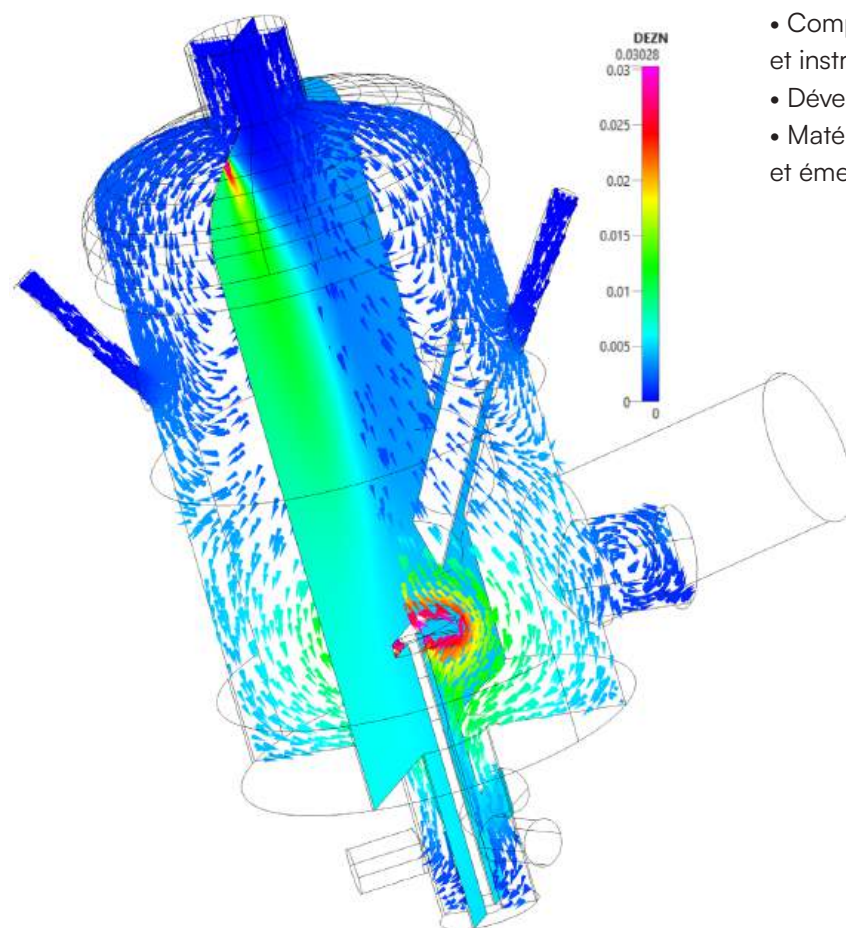
**120** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **26** laboratoires

### OBJECTIFS

Le GDR RAFALD a pour vocation de renforcer les liens entre les équipes de la communauté de l'ALD (procédé de dépôt par couches atomiques de films très minces et conformes à partir de précurseurs gazeux - Atomic Layer Deposition) en France et de les élargir vers des nouveaux utilisateurs de toute la communauté scientifique.

Vecteurs vitesses (colorés par la température) et concentrations de diethylzinc dans un réacteur ALD simulé en mode dynamique.

© Raphaël Boichot, SIMaP, Grenoble-INP



Il vise à faire germer de nouveaux projets, proposer une vision d'avenir des matériaux et des procédés, dans un esprit de "matériaux sur mesure" à partir de cahier des charges de performances visées. L'ambition est de rassembler les connaissances issues des différentes applications "historiques" (microélectronique, énergie) pour élargir à d'autres domaines. Le workshop annuel du même nom permet de fédérer la communauté française des utilisateurs industriels et des chercheurs utilisant la technique ALD, avec la participation de plus de 100 personnes.

### THÉMATIQUES

- Chimie des précurseurs et procédés
- Compréhension des mécanismes de croissance et instrumentation
- Développement de procédés ou réacteurs innovants
- Matériaux pour les applications actuelles et émergentes

Dépôt sélectif contrôlé de  $\text{TiO}_2$  sur  $\text{TiN}$  vs  $\text{SiO}_2$

© Rémi Vallat, Christophe Vallée, LTM/ CNRS, UGA, Rémy Gassilloud, CEA-LETI

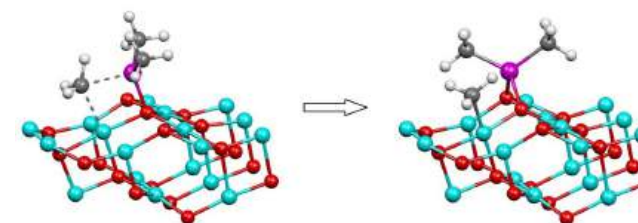


### PROSPECTIVES

La communauté RAFALD poursuit sa mission de proposer des procédés d'élaboration de matériaux de plus en plus performants, avec de nouvelles fonctionnalités. Si les applications dans le domaine de la microélectronique occupent une place importante, les laboratoires du GDR s'investissent également dans les nouveaux domaines d'application de l'ALD. Des matériaux (oxydes, nitrures, métaux, sulfures...) appliqués aux énergies renouvelables (piles à combustible, photovoltaïque...), à la médecine et à la biologie (biocapteurs, implants, membranes pour la détection de biomolécules...), aux textiles techniques ou encore à l'environnement (traitement de l'eau, capteurs et filtres de gaz...) sont développés. La fabrication par ALD de matériaux bidimensionnels (hBN, dichalcogénures de métaux de transition) et de MOFs (Metal Organic Frameworks) représente également un domaine en plein essor.

Dans ces grands domaines d'application, les stratégies de la communauté RAFALD s'orientent autour des axes :

- chimie des précurseurs, avec l'émergence de nouveaux précurseurs pour des procédés innovants tels que ALE (Atomic Layer Etching), l'étude de la dynamique d'évaporation des précurseurs. Ces études peuvent être rendues plus efficaces avec le développement de réacteurs à très bas coût/haut flux pour le criblage systématique des précurseurs ;



Décomposition dissociative de TMA (TriMethyl Aluminium) sur une surface de  $\text{CuO}(11-1)$

© Alain Estève, LAAS/CNRS

- développement de procédés innovants et le soutien vers l'industrialisation : ALD à haut flux ou FAST ALD dont SALD (Spatial ALD), ALD sélective (Area Selective ALD), ALD sur poudre ou infiltration de matériaux poreux organique, MLD (Molecular Layer Deposition) pour le dépôt de couches moléculaires organiques ; ainsi que la modélisation multi-physique associée ;

- compréhension des mécanismes de croissance basée sur des caractérisations avancées (in situ, operando et ex situ), le développement de systèmes et de dispositifs expérimentaux modèles, et l'apport de la modélisation.

Enfin, le GDR RAFALD souhaite se rapprocher de fédérations de recherche et de GDR centrés sur des applications pour faire connaître la technique, élargir la communauté et contribuer à l'essor de l'ALD.

### CONTACTS

Directrice  
**Nathanaelle Schneider (IPVF, Palaiseau)**  
[n.schneider@cncrs.fr](mailto:n.schneider@cncrs.fr)

Directrice adjointe  
**Elisabeth Blanquet (SIMaP, Grenoble)**  
[Elisabeth.blanquet@simap.grenoble-inp.fr](mailto:Elisabeth.blanquet@simap.grenoble-inp.fr)

<http://rafald.org>

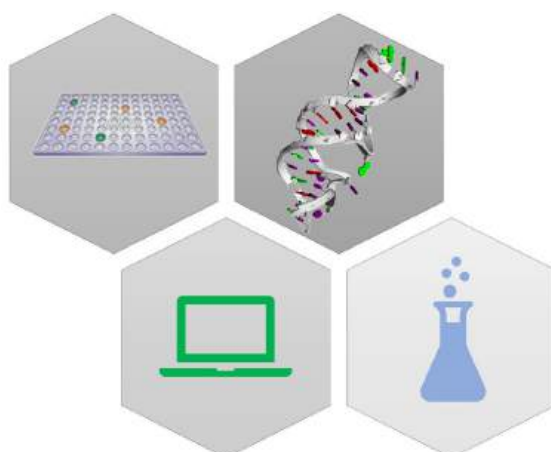
**GDR** Groupement  
de recherche  
**RAFALD** Réseau des acteurs  
français de l'ALD

# GDR RNA

L'ARN en tant qu'outil et cible pour la chimie  
médicinale et la chémobiologie

**130** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **25** laboratoires

## OBJECTIFS



Plusieurs disciplines sont impliquées dans l'étude des ARN d'intérêt thérapeutique : la chimie, la modélisation, la chimie analytique, la biochimie, la biologie structurale ou encore la biologie cellulaire.

© Maria Duca, ICN/Université Côte d'Azur



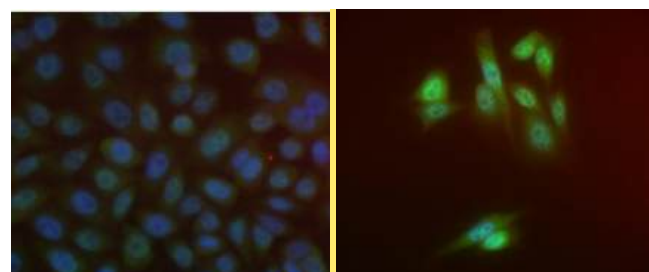
L'ARN est une macromolécule essentielle pour un grand nombre de processus biologiques.

© transféré avec courtoisie par Maria Duca, ICN/Université Côte d'Azur

Le GDR RNA va coordonner et fédérer les efforts de recherche menés par les équipes travaillant dans le domaine du ciblage de l'ARN et du développement d'outils à base d'ARN. Ce GDR a pour but de favoriser les collaborations nationales et de donner à ces travaux la visibilité qu'ils méritent de façon à positionner la recherche française comme leader européen de ce domaine. Une meilleure structuration et visibilité de cette activité peut également conduire à des actions de valorisation fortes, que ce soit par la création de start-ups ou le renforcement de collaborations industrielles. Le démarrage de nouvelles collaborations permettra aussi de développer des projets fondamentaux innovants et à long terme.

## THÉMATIQUES

- Conception et synthèse des outils : de petites molécules ligands d'ARN aux oligonucléotides ARN modifiés
- Étude des interactions : développement d'outils de biochimie et de biophysique pour la compréhension des mécanismes d'interaction au niveau moléculaire et cellulaire
- Applications thérapeutiques : modèles in vitro et in vivo



Plusieurs disciplines sont impliquées dans l'étude des ARN d'intérêt thérapeutique : la chimie, la modélisation, la chimie analytique, la biochimie, la biologie structurale ou encore la biologie cellulaire

© Maria Duca, ICN / Université Côte d'Azur

## PROSPECTIVES

Les activités du GDR RNA sont centrées sur des travaux sur l'ARN, à l'interface de la chimie, biochimie, biophysique, biologie cellulaire et biologie structurale. Elles vont permettre de développer de nouveaux outils thérapeutiques, avec des applications potentielles en clinique, et de nouveaux outils méthodologiques en chémobiologie, afin de mieux comprendre les mécanismes moléculaires et cellulaires dans lesquels les ARN sont impliqués.

### CONCEPTION ET SYNTHÈSE DES OUTILS : DE PETITES MOLÉCULES LIGANDS D'ARN AUX OLIGONUCLÉOTIDES ARN MODIFIÉS

Le ciblage d'ARN d'intérêt thérapeutique peut être effectué selon une approche basée sur l'utilisation d'oligonucléotides reconnaissant une séquence de l'ARN ciblé de manière spécifique et présentant donc une très grande efficacité et spécificité ou une approche basée sur l'utilisation de ligands capables d'interférer avec la structure et/ou la fonction des ARN. Des exemples de ligands spécifiques de structures (ex : G-quadruplexe d'ARN, riboswitch bactérien) ont été identifiés et étudiés. Les deux approches sont donc complémentaires et peuvent converger vers une stratégie de ciblage efficace et applicable à un grand nombre de cibles.

### ÉTUDE DES INTERACTIONS : DÉVELOPPEMENT D'OUTILS DE BIOCHIMIE ET DE BIOPHYSIQUE POUR LA COMPRÉHENSION DES MÉCANISMES D'INTERACTION AU NIVEAU MOLÉCULAIRE ET CELLULAIRE

La découverte d'outils efficaces pour le ciblage d'ARN structurés tant d'un point de vue thérapeutique que de l'étude des mécanismes biologiques dans lesquels ces ARN sont impliqués nécessite la récolte d'un grand nombre d'informations. Une étroite connexion entre la conception et la synthèse de ligands et les expertises en biochimie, biophysique et biologie structurale est donc indispensable au développement de stratégies de ciblage efficaces et spécifiques. C'est grâce à l'ensemble de ces études qu'il est possible d'approfondir la connaissance des paramètres nécessaires pour comprendre et rationaliser le choix de

ligands à synthétiser. Mettre en place ces connexions, grâce aussi au réseau soutenu par le GDR, est un enjeu important pour la réussite des projets de recherche dans le domaine.

### APPLICATIONS THÉRAPEUTIQUES : MODÈLES IN VITRO ET IN VIVO

Les outils conçus et synthétisés (oligonucléotides et petites molécules) devront ensuite être validés in vitro et in vivo en vue de leur application en chimie thérapeutique ou chémobiologie. Afin d'effectuer des études in vitro et surtout au niveau intracellulaire et éventuellement in vivo, il est ainsi nécessaire de développer et de disposer d'outils d'études et modèles adaptés. Le réseau du GDR RNA permettra les interactions nécessaires pour mettre en place des nouvelles collaborations vers des études plus performantes.

## CONTACTS

Directrice  
**Maria Duca (ICN, Nice)**  
[maria.duca@univ-cotedazur.fr](mailto:maria.duca@univ-cotedazur.fr)

Directrice adjointe  
**Carine Tisné (IBPC, Paris)**  
[carine.tisne@ibpc.fr](mailto:carine.tisne@ibpc.fr)

Directeur adjoint  
**Laurent Micouin (LCBPT, Paris)**  
[laurent.micouin@parisdescartes.fr](mailto:laurent.micouin@parisdescartes.fr)

<https://gdr-rna.cnrs.fr>  
**X @RNA\_CNRS**

**GDR** Groupement  
de recherche  
**RNA** L'ARN en tant qu'outil et cible  
pour la chimie médicinale  
et la chémobiologie

# GDR SFN - FRANCE

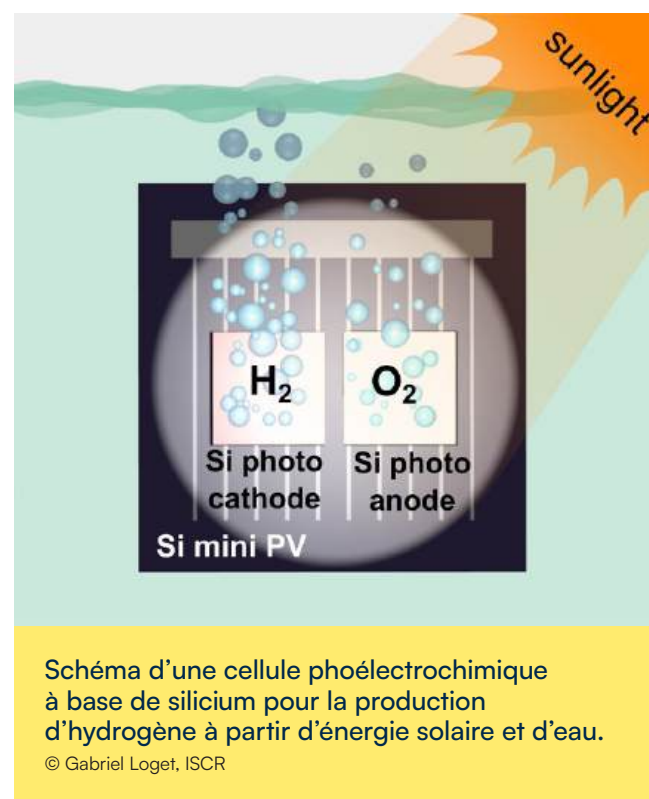
## Solar Fuels Network - France

**130** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **55** laboratoires

## OBJECTIFS

Les objectifs du GDR SFN - FRANCE sont :

- rassembler les acteurs du domaine au sein d'un groupe de recherche dédié pour favoriser les échanges et initier des collaborations entre équipes de compétences complémentaires ;
- réunir des expertises en science des matériaux, chimie moléculaire et biochimie au travers de l'utilisation de concepts et d'approches (nanosciences, bioinspiration, capture de lumière et conversion énergétique, catalyse, mécanismes réactionnels), et du partage de méthodologies et d'outils (électrochimie, photochimie, méthodes de caractérisation avancées et couplées, modélisation et simulation) ;
- permettre le développement de procédés innovants dans le domaine de l'énergie solaire.



## THÉMATIQUES

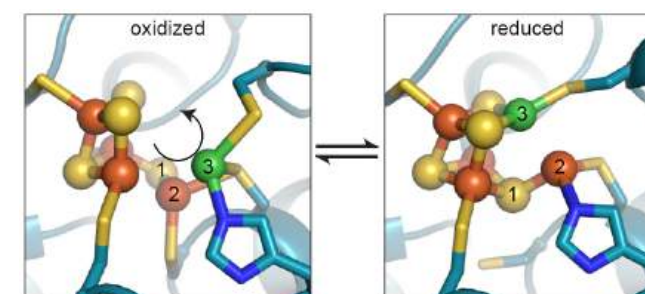
- Approches de chimie des matériaux et nanosciences
- Approches moléculaires et bio-inspirées
- Approches enzymatiques
- Approches théoriques, calculs, modélisations
- Intégration/procédés/couplage de procédés
- Caractérisations spécifiques des matériaux et systèmes

## PROSPECTIVES

Au cours des cinq dernières années, les efforts de recherche dédiés à la production de carburants solaires ont été importants à l'échelle internationale et se concrétisent progressivement avec l'émergence d'approches innovantes en biochimie, chimie moléculaire et science des matériaux, mais aussi avec des avancées conséquentes au niveau des techniques de caractérisation et de modélisation de ces systèmes. En parallèle, à l'échelle européenne, une nouvelle étape est en train d'être franchie avec l'initiative SUNERGY, qui participe à la définition de la feuille de route européenne permettant de répondre aux grands enjeux scientifiques et techniques de la transition énergétique. Le GDR SFN-France, en tant que soutien de cette action, se doit d'être le lieu privilégié des chercheurs français pour échanger sur le domaine, permettant ainsi d'initier des synergies et de structurer une réponse commune aux futurs appels à projet européens.

Sur la période 2016-2020, le GDR Solar Fuels a permis, d'une part la structuration de la communauté scientifique française dans le domaine, mais aussi l'initiation de nouvelles collaborations inter-équipes, avec déjà des résultats très prometteurs. Cette nouvelle dynamique est extrêmement positive pour notre communauté et se doit d'être poursuivie pour la période 2021-2025.

Le comité de pilotage du GDR Solar Fuels, en charge de l'animation scientifique du réseau, est constitué de la direction ainsi que des coordinateurs/animateurs des axes thématiques. L'organisation des réunions annuelles en résidentiel, rassemblant les participants du GDR, est l'élément pivot de l'animation du réseau. Les journées annuelles des carburants solaires sont un lieu important de rencontres et d'échanges pour la communauté, très interdisciplinaire par nature. Les jeunes chercheurs sont particulièrement mis en avant durant ces journées, leur offrant ainsi la possibilité de présenter leur vision de l'avenir des carburants solaires car ce sont eux, à terme, qui porteront les efforts de développement dans ce domaine.



Réarrangement structural du site actif de l'enzyme CO-déshydrogénase, qui réduit le CO<sub>2</sub> en CO.  
© Christophe Léger, LBIP © 2018

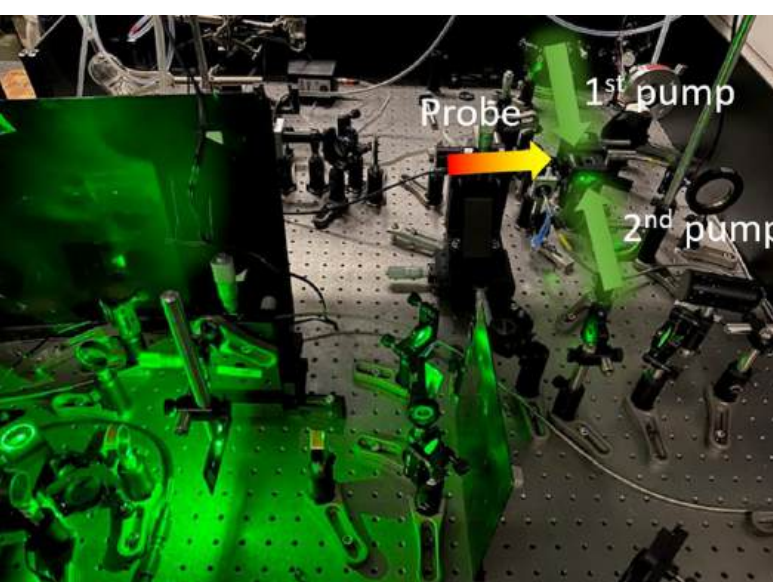
Rassembler des expertises diverses, mais complémentaires pour échanger autour d'un objectif scientifique commun qui est le développement et la diffusion des carburants solaires, c'est la finalité du GDR Solar Fuels.

## CONTACTS

Directrice  
**Valérie Keller (ICPEES, Strasbourg)**  
[vkeller@unistra.fr](mailto:vkeller@unistra.fr)

Directrice adjointe  
**Murielle Chavarot-Kerlidou (LCBM, Grenoble)**  
[murielle.chavarot-kerlidou@cea.fr](mailto:murielle.chavarot-kerlidou@cea.fr)

<https://www.solarfuels.cnrs.fr>



Sonder l'accumulation de charges par spectroscopie pompe-pompe-sonde.  
© Annamaria Quaranta, Minh Huong Ha-Thi/ISMO

**GDR** Groupement  
de recherche  
**SFN - FRANCE Solar Fuels**  
Network - France

# GDR SIGMA-HOLE

## Interaction non covalente de type Sigma-Hole

50 chercheuses et chercheurs impliqués au sein de 20 laboratoires

### OBJECTIFS

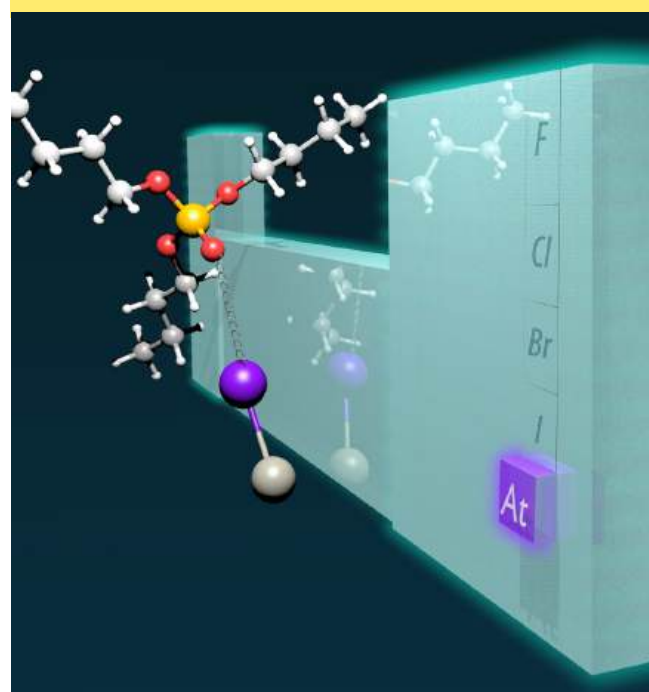
Les interactions de type sigma-hole regroupent une large gamme d'interactions non-covalentes telles que les liaisons halogène, chalcogène et pnictogène. Ces interactions très directionnelles ont en commun l'implication d'atomes présentant, dans le prolongement des liaisons covalentes qu'ils forment, une zone électro-déficiente nommée sigma-hole. Ce dernier conduit ces atomes à interagir de façon non-covalente avec des zones riches en électron, ouvrant ainsi un nouveau domaine de recherche dont les applications à l'état solide ou en solution n'ont cessé de croître depuis le début du 21<sup>ème</sup> siècle. Le GDR Sigma-Hole a pour ambition d'accélérer et faciliter la structuration de la recherche française dans ce domaine interdisciplinaire émergent et d'accroître la visibilité de notre communauté à l'international.

### THÉMATIQUES

- Théorie (chimie théorique et computationnelle)
- Organisation à l'état solide (ingénierie cristalline ; auto-assemblage ; matériaux fonctionnels)
- Réactivité en solution (détection en solution ; catalyse ; chimie supramoléculaire)

Astate, l'élément plus fort donneur de liaison halogène.

© Nicolas Galland, CEISAM/Université de Nantes



### PROSPECTIVES

Le GDR Sigma-Hole a vocation à structurer la communauté française autour de cette thématique pluridisciplinaire en regroupant :

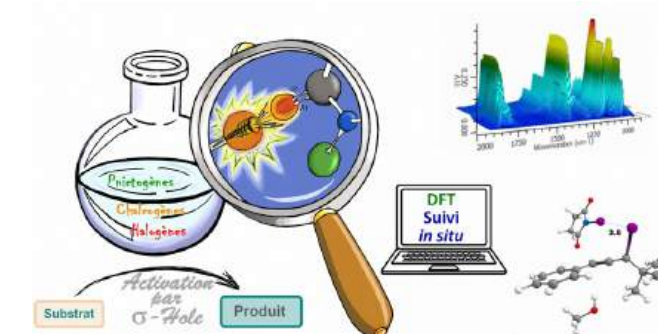
- des **théoriciens** dont l'apport à la thématique des interactions par sigma-hole va du développement d'outils théoriques pour l'étude des interactions non-covalentes à la prévision des propriétés d'interaction de nouveaux systèmes (molécules, catalyseurs, matériaux, surfaces, etc...)
- des **chercheurs en chimie du solide** capables de préparer, caractériser (par exemple par diffraction des rayons X ou par microscopie) et étudier les propriétés de nouveaux matériaux obtenus par interactions sigma-hole
- des **chimistes de synthèse** intéressés par les possibilités apportées par les interactions sigma-hole en catalyse non-covalente ou pour expliquer certaines réactivités en synthèse organique
- des **chercheurs en chimie analytique** afin d'étudier les effets de solvation dont le rôle est primordial en chimie supramoléculaire et de démontrer la formation d'adduits supramoléculaires

Ce rapprochement entre laboratoires sera facilité et soutenu à travers plusieurs actions :

- **diffusion de l'actualité** de la communauté du GDR et veille scientifique
- **organisation de journées scientifiques** afin de favoriser les rencontres entre chercheurs
- **aide à la mobilité** d'étudiants et de chercheurs entre laboratoires sur la base d'un projet commun
- **encouragement des dépôts de projets communs** pour l'accès à des financements nationaux et internationaux
- **aide financière** à la participation à des congrès

Toutes ces actions devraient permettre aux différents laboratoires d'améliorer leur visibilité internationale et de placer la recherche française en position de leader dans ce domaine.

Enfin, de nouveaux axes thématiques, non couverts actuellement par le GDR, pourront être identifiés et intégrés. Ainsi dans une première étape, une étude approfondie permettra sans nul doute d'identifier des laboratoires/équipes travaillant dans le domaine de la biologie. Une intégration de ce nouvel axe permettra très certainement d'accroître encore la visibilité du GDR et de développer de nouveaux projets interdisciplinaires.



Étude des interactions sigma-hole en solution.

© Aurélien Alix, ICMMO/Université Paris-Saclay

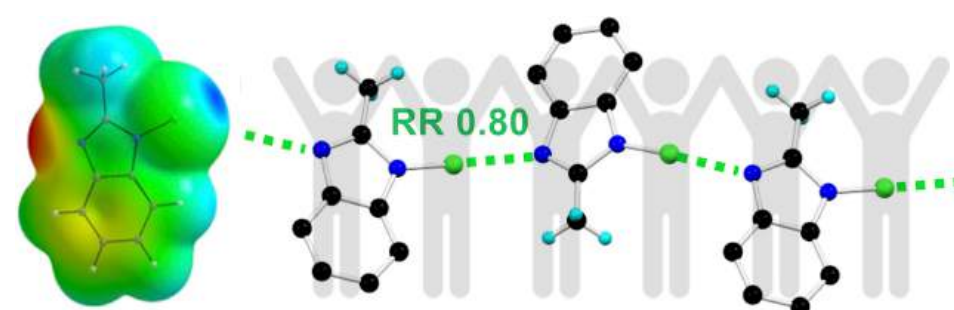
### CONTACTS

Directeur  
**Victor Mamane (IC, Strasbourg)**  
vmamane@unistra.fr

Directrice adjointe  
**Claire Fave (IPCM, Paris)**  
claire.fave@sorbonne-université.fr

<https://sigmahole.chimie.unistra.fr>

**GDR** Groupement de recherche  
**SIGMA-HOLE** Interaction non-covalente de type Sigma-Hole



N-Benzimidazole  
amphotère vers une  
chaîne coopérative grâce  
au chlore fortement  
activé.

© Arun Dhaka, ISCR/Université de  
Rennes 2022 Royal Chemical Society

# GDR SLAMM

## Solliciter la matière molle

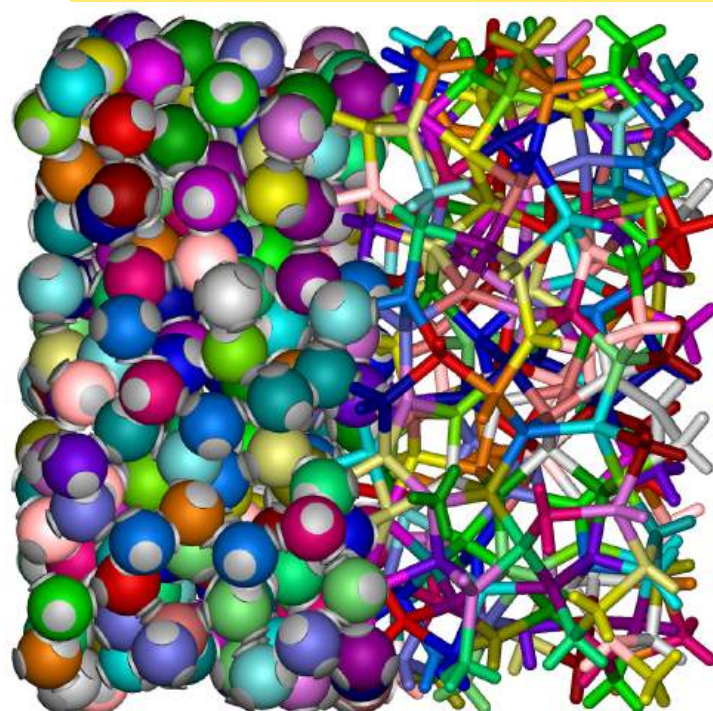
**300** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **40** laboratoires

## OBJECTIFS

SLAMM est un GDR conjoint entre le CNRS et l'INRAE qui regroupe dans une même structure des laboratoires affiliés au département TRANSFORM de l'INRAE et des laboratoires affiliés au CNRS émanant de 3 instituts : CNRS Chimie, CNRS Physique et CNRS Ingénierie. Le GDR SLAMM a ainsi un caractère pluridisciplinaire fort. Sa mission est de réunir différentes communautés de recherche fondamentale et appliquée autour du comportement de fluides complexes à différentes échelles. L'objectif premier de SLAMM est l'animation scientifique de l'ensemble de la communauté de la matière molle, une communauté très active en France, mais encore peu structurée.

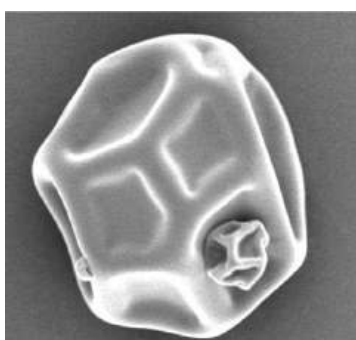
Fluide de particules à patchs.

© Franck Smalenburg, LPS Orsay



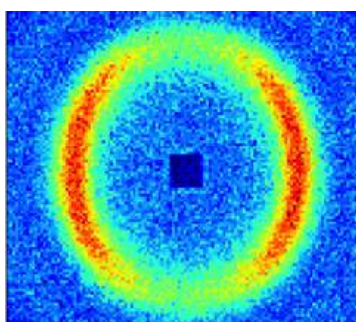
Grain de poudre de caséine micellaire.

© Cécile Le Floch-Fouéré, STLO, Rennes



Spectre 2D de diffusion de neutrons aux petits angles.

© Bernard Cabane, ESPCI, Paris



## THÉMATIQUES

- Interactions et assemblage en volume et aux interfaces
- Transport et diffusion
- Structuration multi-échelle
- Déformations et déstructuration sous contrainte

## PROSPECTIVES

SLAMM se propose de caractériser, rationaliser, modéliser, et prédire les comportements complexes de la matière molle, à l'équilibre et sous l'effet de sollicitations, avec deux motivations principales : dégager des comportements universels, communs à de nombreux systèmes expérimentaux et répondre à des questions plus spécifiques en lien avec des applications, les fluides complexes étant en effet omniprésents dans la vie de tous les jours (produits alimentaires, cosmétiques, boues, peintures...), et au cœur de nombreux domaines industriels, comme l'agroalimentaire, les revêtements, ou la récupération assistée du pétrole. SLAMM regroupe dans une même structure la physique, la chimie, la science des aliments et des bioproduits, et les procédés, avec une communauté riche d'environ 300 chercheurs issus d'une quarantaine de laboratoires. Les missions principales de SLAMM sont la structuration et l'animation scientifique de cette communauté à travers :

- le partage de la connaissance scientifique ;
- la mise à disposition et la circulation d'informations utiles aux chercheurs ;
- la catalyse d'interactions pluridisciplinaires ;
- une ouverture vers le monde industriel.

Pour mener à bien ces missions, SLAMM s'appuie sur les réunions scientifiques organisées régulièrement sous plusieurs formats :

- des ateliers thématiques abordant des sujets d'actualité, des questionnements scientifiques et/ou technologiques tels que : *Le transport et la diffusion en matière molle, Les protéines sont-elles des colloïdes/polymères comme les autres ? Comportement rhéologique aux grandes déformations*, avec des présentations données par des membres de SLAMM et des conférences invitées données par des intervenants internationaux ;
- des journées plénières annuelles qui permettent d'initier les échanges entre jeunes chercheuses/chercheurs et ceux

confirmés en combinant séances de posters animés, présentations scientifiques courtes et conférences plénières. L'organisation de tables rondes permet de faire le point, aussi bien sur des aspects méthodologiques<sup>1</sup>, que sur l'accès aux grands instruments de mesures et leur apport<sup>2</sup> ;

- le volet formation est appréhendé sous forme de cours-conférences en ligne sur des techniques ou concepts transverses (par ex. *Les interactions électrostatiques en matière molle, les techniques de diffusion de rayonnement, la RMN et matière molle*).

<sup>1</sup> Les méthodes de mesure pour un échantillon hétérogène : échantillonnage et représentativité

<sup>2</sup> Utilisateurs rayonnement synchrotron et Upgrade SOLEIL horizon 2025 : Qu'attendez-vous de l'upgrade dans vos thématiques de recherche ?

## CONTACTS

Directrice  
**Laurence Ramos (L2C, Montpellier)**  
[laurence.amos@umontpellier.fr](mailto:laurence.amos@umontpellier.fr)

Directeurs adjoints  
**Antoine Bouchoux (INRA TBI, Toulouse)**  
[antoine.bouchoux@insa-toulouse.fr](mailto:antoine.bouchoux@insa-toulouse.fr)

**Ludovic Pauchard (FAST, Orsay)**  
[pauchard@fast.u-psud.fr](mailto:pauchard@fast.u-psud.fr)

<https://slamm.cnrs.fr>

**GDR** Groupement  
de recherche  
**SLAMM** Solliciter la matière molle

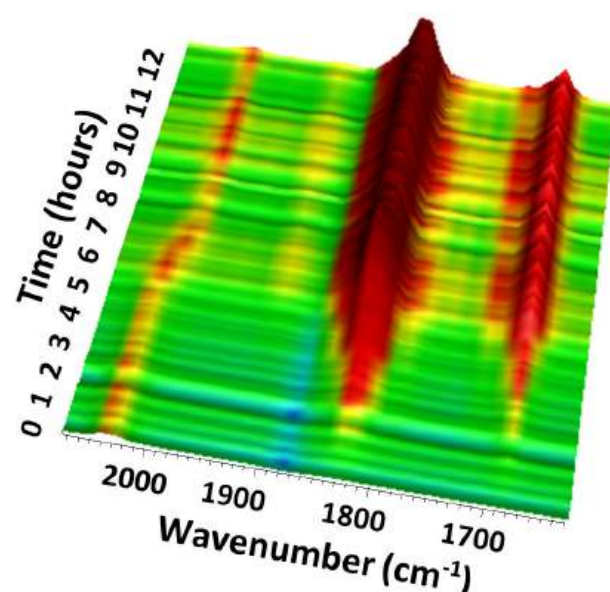
# GDR SOLVATE

## Solvation : avancées théoriques et expérimentales

**100** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **37** laboratoires

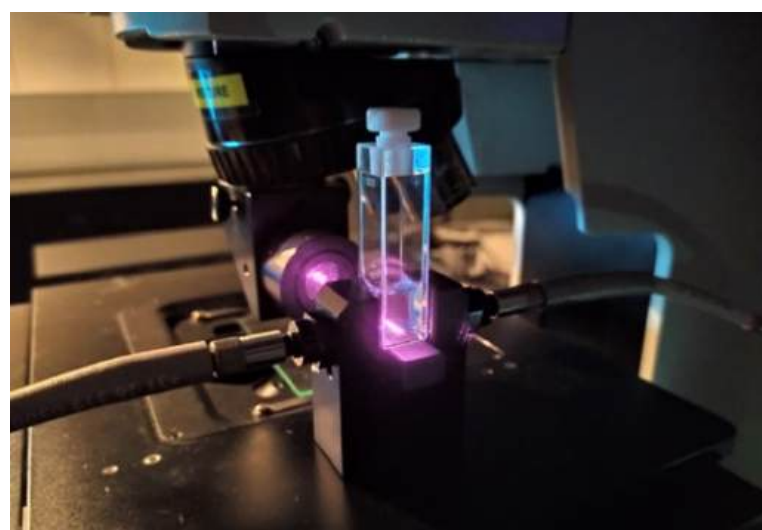
### OBJECTIFS

L'importance des effets de solvant a continuellement poussé les limites des connaissances, dans la recherche de base comme dans des domaines applicatifs. Une mission essentielle du GDR SolvATE est de faire surgir la problématique générale de la solvation comme un domaine transverse primordial de la chimie et la physico-chimie. Nous souhaitons promouvoir les échanges entre les chercheurs français, théoriciens et expérimentateurs, qui étudient l'influence du solvant au niveau moléculaire pour la compréhension des processus chimiques, sous des angles complémentaires. L'organisation de cette communauté dynamique en réseau de laboratoires lui donne une identité et fait émerger des projets de pointe en relation avec des partenaires extérieurs au monde académique.



Étude cinétique (ATR-IR) de la synthèse du carbonate d' $\alpha$ -alkylidène (couplage catalytique du  $\text{CO}_2$  avec le 2-méthyl-3-butyn-2-ol).

© Thierry Tassaing, ISM, Bordeaux

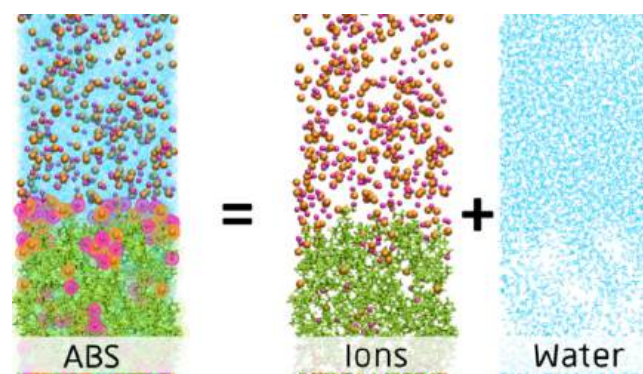


Analyse simultanée par spectroscopie UV/VIS et diffusion Raman d'une solution aqueuse.

© Thierry Tassaing, ISM, Bordeaux

### THÉMATIQUES

- Les solvants en chimie : vers un avenir durable
- Solvation et interfaces/surfaces, milieux nanoconfinés
- La solvation dans les systèmes d'intérêt biologique, pharmaceutique, agroalimentaire



Systèmes biphasiques aqueux à base de liquides ioniques : étude par dynamique moléculaire.

© Rachel Schurhammer, université de Strasbourg

### PROSPECTIVES

Le GDR SolvATE a pour objectif principal de faire avancer la connaissance sur les phénomènes liés à la solvation afin de répondre à des défis scientifiques identifiés allant jusqu'à l'optimisation de procédés industriels. Les forces de ce projet résident dans l'existence d'interactions théorie-expérience entre les partenaires, la mise en œuvre d'approches interdisciplinaires et le développement de méthodologies originales.

Le projet scientifique du GDR s'articule autour de trois axes thématiques.

#### LES SOLVANTS EN CHIMIE : VERS UN AVENIR DURABLE

Développer une recherche de base qui vise à éclaircir l'effet du solvant sur la réactivité chimique ouvrira des perspectives importantes pour des applications technologiques et industrielles. L'interaction de spécialistes du domaine fera émerger des nouvelles stratégies pour répondre aux demandes de processus respectueux de l'environnement.

#### SOLVATION ET INTERFACES/SURFACES, MILIEUX NANOCONFINÉS

Les processus chimiques qui ont lieu aux interfaces/surfaces et dans des milieux nanoconfinés révèlent des spécificités qui peuvent être utilisées pour construire une nouvelle chimie en solution. La présence dans ce GDR de chercheurs travaillant dans des environnements très divers représente un atout important pour favoriser des interactions visant à faire émerger des nouvelles technologies (distillation, extraction, développement de matériaux, électrochimie...).

#### LA SOLVATION DANS LES SYSTÈMES D'INTÉRÊT BIOLOGIQUE, PHARMACEUTIQUE, AGROALIMENTAIRE

Nous comptons sur la richesse des domaines de recherche dans lesquels les membres du groupement travaillent (recherche fondamentale, design de procédés, applications dans les domaines pharmaceutique et agro-alimentaire)

pour apporter un éclairage innovant aux phénomènes biologiques qui sont sensibles à l'environnement et permettre de développer des technologies biocompatibles et des approches analytiques originales.

#### FAITS MARQUANTS

Depuis la création du GDR, un thème prioritaire a émergé et a généré des nouvelles dynamiques, celui des solvants eutectiques profonds ; des actions spécifiques ont été montées autour de ce sujet innovant. Une autre thématique qui nous a apporté des nouvelles synergies est celle de la solvation aux interfaces solide-liquide, avec des interactions possibles avec d'autres communautés (électrochimie, énergie). Finalement, des développements théoriques importants sont en cours dans le domaine des calculs des énergies libres de solvation et de la mise au point de champs de force performants.

### CONTACTS

Directrice  
**Francesca Ingrosso (LPCT, Nancy)**  
[Francesca.Ingrosso@univ-lorraine.fr](mailto:Francesca.Ingrosso@univ-lorraine.fr)

Directeur adjoint  
**Abdenacer Idrissi (LASIRE, Lille)**  
[Nacer.Idrissi@univ-lille.fr](mailto:Nacer.Idrissi@univ-lille.fr)

<https://solvate.cnrs.fr>

**GDR** Groupement  
de recherche  
**SolvATE** Solvation : avancées  
théoriques et expérimentales

# GDR SYNTH FLUX

Synthèse organique, inorganique  
et macromoléculaire en flux continu

**150** chercheuses et chercheurs  
impliqués au sein de **28** laboratoires

## OBJECTIFS



Dispositif de synthèse en flux continu.  
© INSA Rouen

Contrairement à d'autres sciences qui ont révolutionné leurs concepts au cours des dernières décennies, la chimie de synthèse utilise plus ou moins les mêmes outils depuis les années 1950, notamment le réacteur. Il existe pourtant aujourd'hui une technologie alternative à ces macroréacteurs batch : les réacteurs miniaturisés en flux continu.

Créé en 2019, le GDR Synth Flux vise à fédérer les laboratoires émergents en chimie en continu, et à promouvoir cette technologie. Il s'agit particulièrement de créer des passerelles entre le génie des procédés, la chimie analytique et de synthèse, la formulation et l'automatisation voire l'autonomisation, pour penser la chimie de demain.

## PROSPECTIVES

### POLYMÈRES

La distribution des longueurs de chaînes et la valeur moyenne (paramètres clés orientant les propriétés des polymères) sont très fortement affectées par la présence de gradients de concentration et de température au sein du réacteur. Les réacteurs à flux continu permettent eux, d'assurer des conditions de transfert les plus homogènes possibles lors de la synthèse, tout en autorisant l'emploi de conditions opératoires extrêmes, pour augmenter significativement le taux de conversion du monomère, la masse molaire moyenne et un meilleur contrôle de la croissance des chaînes.

### NANOMATÉRIAUX

La synthèse de nanomatériaux a connu une révolution avec l'introduction des techniques micro- et milli-fluidiques pour un meilleur contrôle des conditions opératoires conduisant à une meilleure reproductibilité pour la synthèse contrôlée de nanomatériaux. Le flux continu offre une solution de choix pour la production de nouveaux nanomatériaux aux applications multiples.

### FORMULATION

La formulation des émulsions n'a pas échappé à l'essor de la microfluidique. Des recherches pour comprendre des phénomènes liés à leur stabilité ou le développement des particules et des structures complexes ont vu le jour. En effet, les émulsions multiples sont souvent la "matrice" pour l'obtention des microcapsules ou vésicules et les recherches dont le but est de développer des applications pharmaceutiques ou cosmétiques ne cessent d'augmenter.

### CHIMIE PHARMACEUTIQUE DU FUTUR

Les dispositifs en flux continu offrent des systèmes intégrés pour la découverte et la production de molécules bioactives tout en réduisant les étapes d'intensification. La souplesse de ces dispositifs permet d'y connecter différents outils d'analyse pour un suivi réactionnel en temps réel. De plus, le système est intégralement pilotable par informatique et les progrès de l'intelligence artificielle (via le *machine learning*) devraient

permettre, dans un futur proche, d'avoir des systèmes tout automatisés, voire autonomes, pour la *drug discovery*.

### NOUVEAUX RÉACTEURS EN FLUX

L'accessibilité de la CAO et de l'impression 3D permettent de réaliser facilement des réacteurs aux caractéristiques géométriques adaptées spécifiquement à des réactions cibles. Ces réacteurs à façon permettent une intensification sélective des processus physiques et chimiques.

### FORMATION

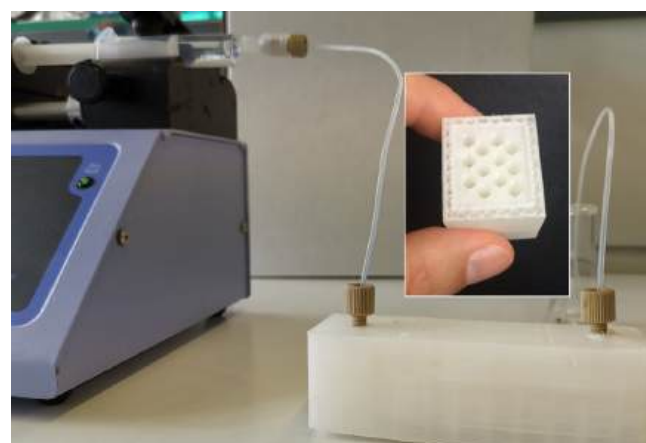
Alors que la production en réacteurs batch ne nécessite pas de fortes compétences, la production en flux continu requiert une plus grande technicité. Le développement de la synthèse en flux est donc une occasion unique de dynamiser les industries locales et d'augmenter leur potentiel d'innovation.

## THÉMATIQUES

- Chimie fine (méthodologie, chimie médicinale, intensification)
- Objets et systèmes nano, macro et supramoléculaires (nanoparticules, polymères, formulation)
- Outils et méthodes (conception de réacteurs, analyse en ligne)



Réacteur tubulaire photochimique.  
© INSA Rouen



Microréacteur pour flux continu fabriqué par  
impression 3D et coupe transversale.  
© INSA Rouen

## CONTACTS

Directeur  
**Julien Legros (COBRA, Rouen)**  
[julien.legros@univ-rouen.fr](mailto:julien.legros@univ-rouen.fr)

Directeur adjoint  
**Maël Penhoat (MSAP, Lille)**  
[mael.penhoat@univ-lille.fr](mailto:mael.penhoat@univ-lille.fr)

<https://gdrsynth-flux.cnrs.fr>

**GDR** Groupement  
de recherche  
**Synth Flux** Synthèse organique,  
inorganique et macromoléculaire  
en flux continu

# GDR THEMOSIA

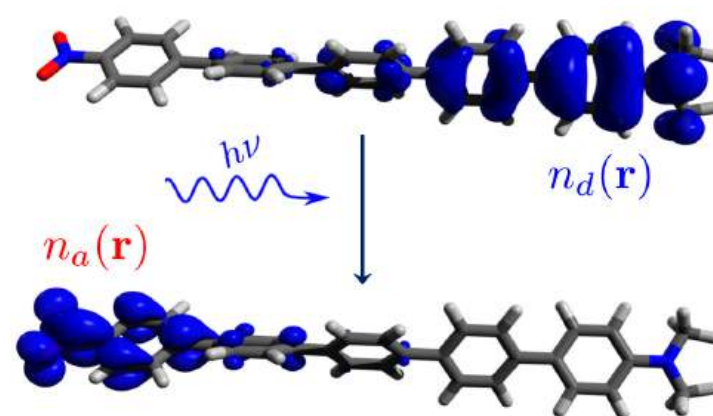
Théories, modélisation et simulations atomistiques

500 chercheuses et chercheurs impliqués au sein de 50 laboratoires

## OBJECTIFS

ThéMoSiA est un GDR de CNRS Chimie créé en 2010 qui rassemble en son sein l'ensemble des chimistes théoriciens travaillant dans plus d'une cinquantaine de laboratoires de recherche académique français.

Cette communauté scientifique s'appuie sur un large socle de connaissances et d'outils communs tout en comportant un panel étendu de sous-disciplines. Le spectre de recherche dans lequel ses membres travaillent enveloppe la chimie, la physique, la biologie et les matériaux, ce qui a pour conséquence la présence de chimistes théoriciens dans toutes les sections de CNRS Chimie.

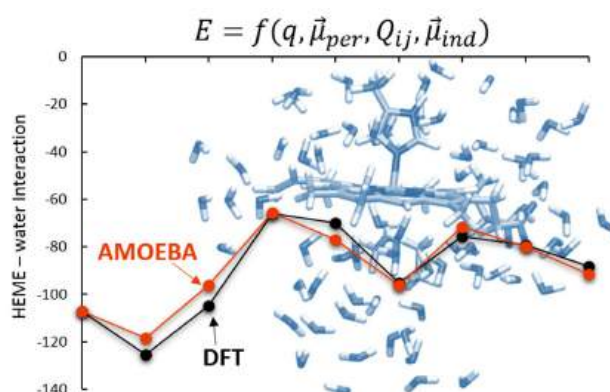


Orbitales moléculaires pour la transition électronique d'un système de type donneur-accepteur.

© Thibaut Etienne, ICGM Montpellier

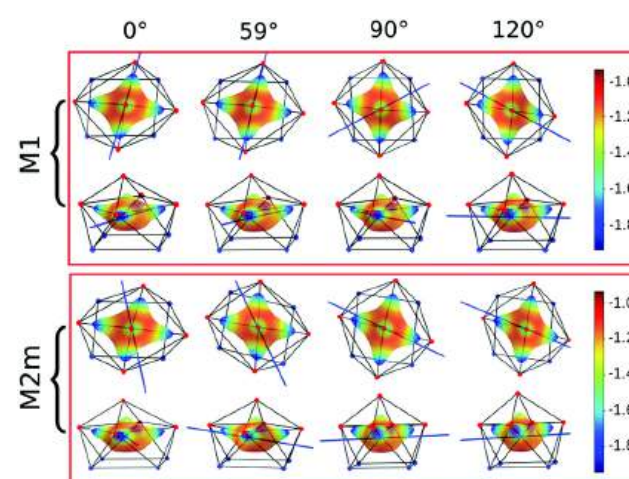
## THÉMATIQUES

- Animation de la communauté scientifique (soutien aux manifestations scientifiques, rencontres nationales et rencontres prospectives en alternance, prix de thèse Gaston Berthier)
- Formation des jeunes chercheurs (théoriciens ou expérimentalistes) aux outils de la chimie théorique
- Valorisation des logiciels développés dans les laboratoires français (archivage, soutien à la mise en place de collaborations entre laboratoires)



Énergie d'interaction du cofacteur hème avec des gouttelettes d'eau calculée par DFT et avec le champ de force AMOEBA.

© Xiaojing Wu © 2018 American Chemical Society



Potentiel électrostatique dans des aimants moléculaires à base de lanthanides.

© Boris Leguennic, Institut des sciences chimiques de Rennes  
© 2019 Royal Society of Chemistry. (M. Briganti, et al. Chem. Sci., 2019, 10, 7233-Published by The Royal Society of Chemistry)

## PROSPECTIVES

ThéMoSiA est un groupement de recherche multidisciplinaire visant à rassembler toutes les personnes en France développant ou utilisant des méthodologies allant de la mécanique quantique aux modélisations mésoscopiques, et ayant en commun un intérêt particulier pour l'échelle atomique. Elle se situe au carrefour d'un grand nombre de domaines de recherche et d'applications. Ses membres sont fédérés autour de l'utilisation et du développement d'outils théoriques afin de mettre en œuvre les mutations méthodologiques permettant de répondre aux enjeux scientifiques actuels et futurs de ces domaines. ThéMoSiA a en effet pour but de soutenir les recherches à chaque échelle, de permettre un partage de connaissances entre ses membres, de créer les passerelles et d'initier des interfaces entre méthodes, de permettre l'émergence de nouveaux concepts. Le GDR s'articule autour de trois points.

### RECHERCHE

De nombreuses actions sont déjà initiées dans le cadre du GDR, notamment sous forme d'aide à la mise en place de collaborations et à l'organisation de manifestations scientifiques. Les échanges entre membres de la communauté sont également facilités par l'organisation de rencontres prospectives sur des questions spécifiques et par l'organisation bisannuelle des Rencontres Nationales qui rassemblent toutes les spécialités.

### LOGITHÈQUE

La logithèque a pour mission de proposer un archivage pérenne des logiciels associés aux thématiques couvertes par le GDR ThéMoSiA (que ce soit dans un but de recherche ou de formation) et développés dans les laboratoires français. L'objectif est de valoriser ceux-ci en proposant des archives accessibles à tous (dans une démarche open-access) permettant la reproductibilité des résultats associés à l'utilisation de ces logiciels ainsi que d'inciter les dépôts de licence auprès de l'agence de protection des programmes. L'objectif est également

de favoriser leur diffusion en proposant des actions de formation aux chercheurs souhaitant les exploiter<sup>1</sup>.

### FORMATION

L'axe formation comporte cinq objectifs : l'organisation d'écoles d'été, la mise en place d'une formation en ligne, en présentiel (label), de formations des utilisateurs par les développeurs (appels à projets "collaboration" de ThéMoSiA) et de formations spécifiques pour les développeurs en lien avec la future logithèque.

<sup>1</sup> <http://www.chimie-theorique.cnrs.fr/spip.php?article784>

## CONTACTS

Directeur  
**Rémi Maurice (ISCR, Rennes)**  
[remi.maurice@univ-rennes.fr](mailto:remi.maurice@univ-rennes.fr)

Directrice adjointe  
**Maylis Orio (ISM, Marseille)**  
[maylis.orio@univ-amu.fr](mailto:maylis.orio@univ-amu.fr)

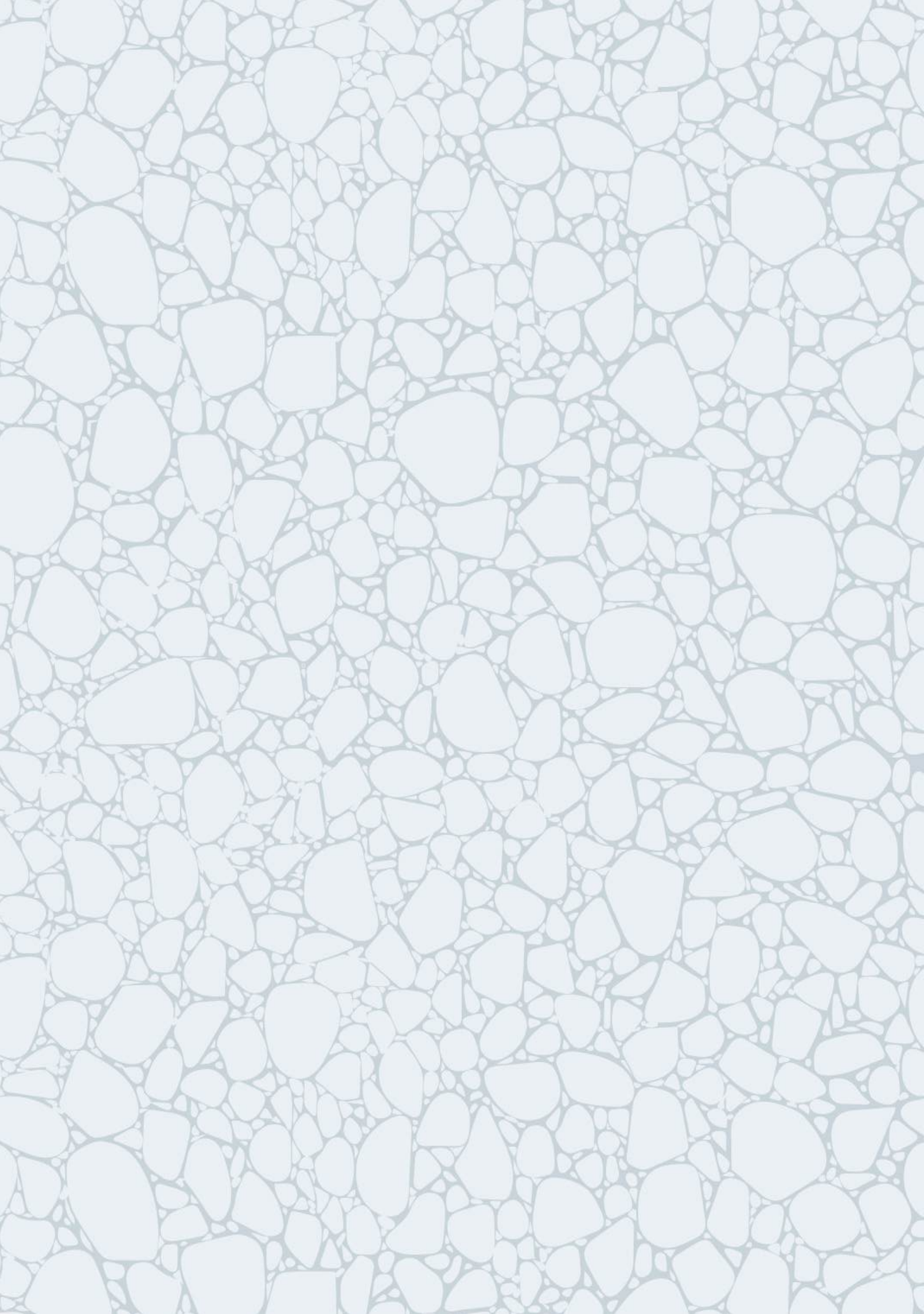
<https://themosia.cnrs.fr/>  
**X @RFCTheo**

**GDR** Groupement de recherche  
**THEMOSIA** Théories, modélisation et simulations atomistique

# Index

## Répartition par sections principales pilotées par CNRS Chimie

|                      |                                                                                      |    |                      |                                                                                                                                      |    |
|----------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|----|----------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| SECTION<br><b>13</b> | Biomimétisme et bioinspiration (BIOMIM)                                              | 16 | SECTION<br><b>16</b> | Bioingénierie des interfaces (B2i)                                                                                                   | 14 |
|                      | Durabilité et matériaux biosourcés (DUMBIO)                                          | 30 |                      | Conversion thermochimique de la biomasse et des déchets (THERMOBIO)                                                                  | 26 |
|                      | Relations structures/propriétés électriques dans les polymères & composites (REEPOS) | 58 |                      | Macrocycles pyrroliques (MAPYRO)                                                                                                     | 38 |
|                      | Solliciter la matière molle (SLAMM)                                                  | 68 |                      | Nanostructures inorganiques par chimie en solution (NINO)                                                                            | 44 |
|                      |                                                                                      |    |                      | Solar Fuels Network - France (SFN FRANCE)                                                                                            | 64 |
| SECTION<br><b>14</b> | Chiralité et multifonctionnalité (CHIRAFUN)                                          | 22 | SECTION<br><b>17</b> | Alliages métalliques par/pour la fabrication additive (ALMA)                                                                         | 8  |
|                      | Phosphore                                                                            | 50 |                      | Composites à matrice céramique : conception, modélisation, caractérisation (CMC) <sup>2</sup>                                        | 24 |
|                      | Interaction non covalente de type Sigma-Hole (SIGMA-HOLE)                            | 66 |                      | Couplage mécanique oxydation diffusion (CONCORD)                                                                                     | 28 |
|                      | Synthèse organique, inorganique et macromoléculaire en flux continu (SYNTH FLUX)     | 72 |                      | Métallurgie des alliages à haute entropie et concentrés complexes (HEA)                                                              | 34 |
| SECTION<br><b>15</b> | Batteries redox flow (REDOXFLOW)                                                     | 10 |                      | Nanomatériaux manufacturés, toxicologie, écotoxicologie et risques : vers un développement maîtrisé (NAMASTE)                        | 42 |
|                      | Cavitation                                                                           | 18 |                      | Procédés hydrométallurgiques pour la gestion intégrée des ressources primaires et secondaires (PROMÉTHÉE)                            | 56 |
|                      | Hydrates de gaz (HYDRATES)                                                           | 32 |                      | Réseau des acteurs français de l'ALD (RAFALD)                                                                                        | 60 |
|                      | Imagerie par Spectrométrie de masse (MSI)                                            | 36 | SECTION<br><b>18</b> | Agents d'imagerie moléculaire (AIM)                                                                                                  | 6  |
|                      | New Molecular Electronics (NEMO)                                                     | 46 |                      | Big data en chimie (BIGDATAACHIM)                                                                                                    | 12 |
|                      | Photo-électro stimulation (PES)                                                      | 48 |                      | Chémobiologie (CHEMBIO)                                                                                                              | 20 |
|                      | Plasmonique active                                                                   | 52 |                      | Mécanismes et dynamiques de formation des assemblages protéiques auto-organisés pathologiques, thérapeutiques, bio-inspirés (MÉDYNA) | 40 |
|                      | Problème quantique à N corps en chimie et physique (NBODY)                           | 54 |                      | L'ARN en tant qu'outil et cible pour la chimie médicinale et la chémobiologie (RNA)                                                  | 62 |
|                      | Solvatation : avancées théoriques et expérimentales (SOLVATE)                        | 70 |                      |                                                                                                                                      |    |
|                      | Théorie, modélisation et simulations numériques (THEMOSIA)                           | 74 |                      |                                                                                                                                      |    |



## LES GROUPEMENTS DE RECHERCHE EN CHIMIE ÉDITION 2025

Ce fascicule compile les Groupements de recherche (GDR) pilotés par CNRS Chimie, actifs en 2024.

### Coordination éditoriale :

Pascal Granger, délégué scientifique pour les GDR ; [pascal.granger@cnrs.fr](mailto:pascal.granger@cnrs.fr)

CNRS Chimie - Service communication / [cnrs-chimie.communication@cnrs.fr](mailto:cnrs-chimie.communication@cnrs.fr) / [www.inc.cnrs.fr](http://www.inc.cnrs.fr)

**Crédit photo couverture :** © Morgan Rusibowicz, PhD Thesis SIMaP 2020/UGA Grenoble-INP

Surface de cuivre oxydée. GDR CONCORD - Couplage mécanique oxydation diffusion.

**Mise en page et impression :** CNRS / Île-de-France service mutualisé / Secteur de l'imprimé / WL



**RÉPUBLIQUE  
FRANÇAISE**

*Liberté  
Égalité  
Fraternité*





**CHIMIE**

**CNRS**

3, rue Michel-Ange  
75794 Paris Cedex 16  
+ 33 1 44 96 40 00

[www.cnrs.fr](http://www.cnrs.fr) | [X](#) | [LinkedIn](#) | [YouTube](#)