



INC

**LES GROUPEMENTS
DE RECHERCHE
EN CHIMIE**

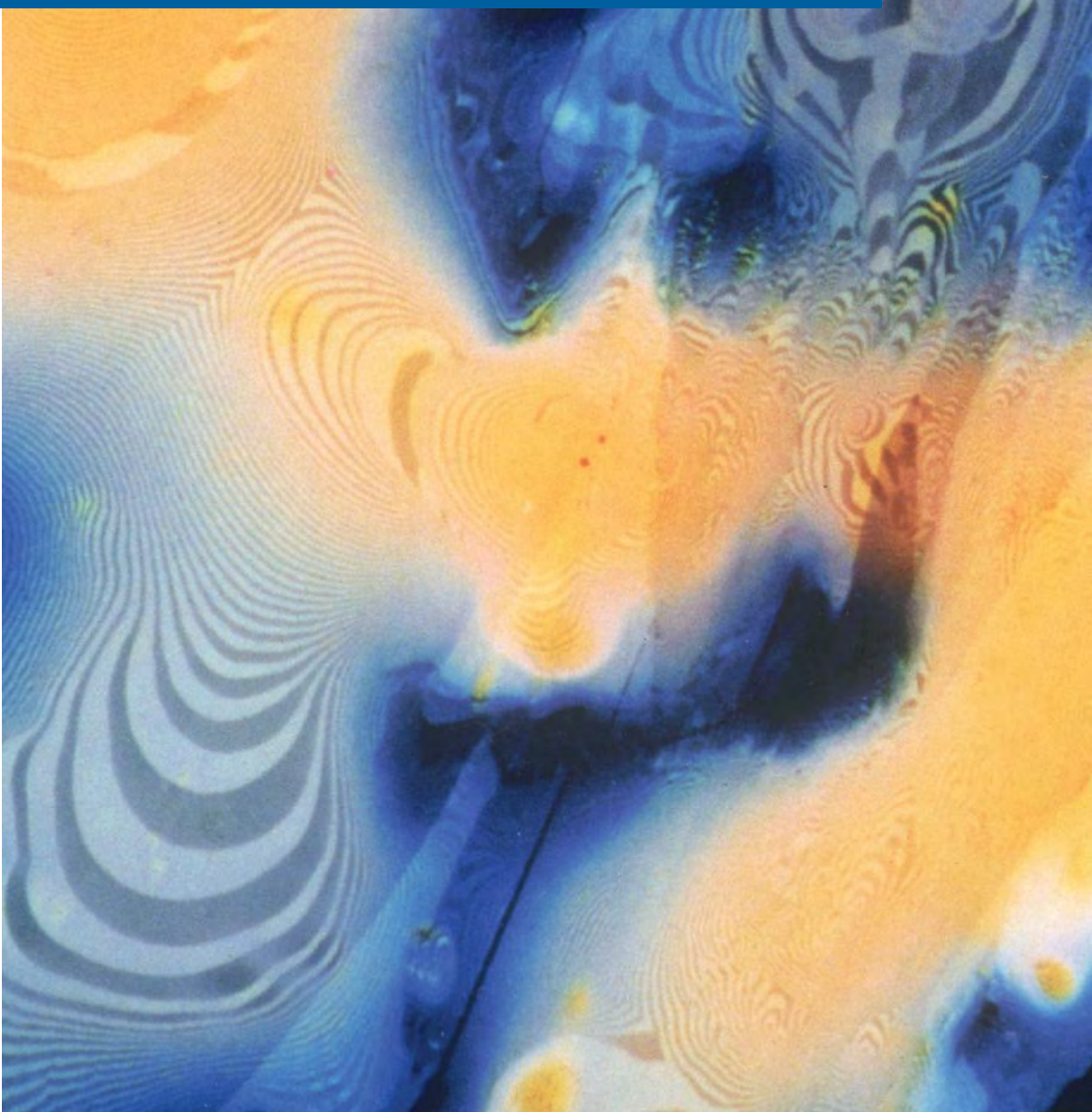


TABLE DES MATIÈRES

Agents d'imagerie moléculaire (AIM)	4
Alliages métalliques par/pour la fabrication additive (ALMA)	6
Batteries redox flow (REDOXFLOW)	8
Big data en chimie (BIGDATACHIM)	10
Bioactifs et cosmétique (COSM'ACTIFS)	12
Bioingénierie des interfaces (B2i)	14
Biomimétisme et bioinspiration (BIOMIM)	16
Cavitation	18
Chiralité et multifonctionnalité (CHIRAFUN)	20
Composites à matrice céramique : conception, modélisation, caractérisation (CMC) ²	22
Conversion thermochimique de la biomasse et des déchets (THERMOBIO)	24
Couplage mécanique oxydation diffusion (CONCORD)	26
Hydrates de gaz (HYDRATES)	28
Liquides ioniques et polymères (LIPS)	30
Macrocycles pyrroliques (MAPYRO)	32
Magnétisme et commutation moléculaires 2 (MCM2)	34
Mécanismes et dynamiques de formation des assemblages protéiques auto-organisés (MÉDYNA)	36
Multifonction des peptides antimicrobiens (MUFOPAM)	38
Odorants – odeur – olfaction (O3)	40
Phosphore	42
Photo-électro stimulation (PES)	44
Plasmonique active	46
Problème quantique à N corps en chimie et physique (NBODY)	48
Procédés hydrométallurgiques pour la gestion intégrée des ressources primaires et secondaires (PROMÉTHÉE)	50
Réseau des acteurs français de l'ALD (RAFALD)	52
Réseau français de chimie théorique (RFCT)	54
RNA L'ARN en tant qu'outil et cible pour la chimie médicinale et la chémobiologie (RNA)	56
SFN – France Solar Fuels Network – France (SFN FRANCE)	58
Solvatation : avancées théoriques et expérimentales (SOLVATE)	60
Solliciter la matière molle (SLAMM)	62
Substances naturelles : méthodes et stratégies de synthèse – Les défis de demain (SNMS2)	64
Synthèse organique, inorganique et macromoléculaire en flux continu (SYNTH FLUX)	66
Thermodynamique des matériaux à haute température (THERMATHT)	68
Thermodynamique moléculaire et des procédés (THERMO)	70

LES GROUPEMENTS DE RECHERCHE EN CHIMIE ÉDITION 2020

Ce fascicule compile les Groupements de recherche (GDR) pilotés par l'Institut de chimie du CNRS, actifs en décembre 2020 dont les plus anciens ont été créés en 2010.

Coordination éditoriale :

Pascal Granger
Chargé de mission pour les GDR – pascal.granger@cnrs.fr

Institut de chimie du CNRS – Service communication : inc.communication@cnrs.fr

www.cnrs.fr/inc

 [@INC_CNRS](https://twitter.com/INC_CNRS)



© Frédérique Pias, CNRS Photothèque

Les Groupements de recherche (GDR) sont des structures singulières du CNRS dans lesquelles différentes communautés scientifiques partagent leurs connaissances propres et unissent leurs forces pour faire prospérer un domaine bien défini. L'interdisciplinarité et les approches multi-échelles qui en découlent font l'originalité et la force de ces réseaux. Cette spécificité est importante dans un environnement de recherche complexe avec des appels à projets nationaux et/ou européens de plus en plus compétitifs. De ce point de vue, le GDR peut devenir un instrument puissant pour définir de

nouvelles orientations scientifiques, décliner de nouveaux choix stratégiques voire, à l'extrême, transformer de nouvelles connaissances théoriques ou pratiques en un champ scientifique à part entière.

Jusqu'à présent, la création des GDR est proposée sur la base d'une réflexion amont initiée par un groupe de chercheurs et d'enseignants-chercheurs qui peuvent être associés à d'autres organismes, tels que le CEA, IFPEN, INSERM, INRIA... Le cadre du GDR offre alors l'opportunité à ces équipes de recherche de se rencontrer. L'industrie peut être aussi partie prenante si les développements sont susceptibles de donner lieu à valorisation et/ou maturation de projets pré-industriels.

L'analyse des motivations et des objectifs se fait, elle, en concertation avec l'Institut de chimie du CNRS (INC) qui confie au GDR trois missions essentielles :

- animation d'une communauté qui se reconnaît autour d'un domaine thématique ;
- 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.

Les GDR remplissent également une mission de formation. Ils sont en effet source d'innovation, innovation qui doit diffuser dans les communautés concernées. Ils sont aussi un lieu de partage de savoirs et de connaissances à destination des plus jeunes, doctorants, et postdoctorants. L'organisation d'écoles thématiques est donc un point essentiel, qui entre souvent dans le cadre de la politique de formation permanente mise en place par le CNRS pour l'ensemble de ses personnels.

Ce fascicule met à l'honneur les 34 GDR que l'Institut de chimie pilote. Chacun y présente de façon très synthétique ses objectifs et ses perspectives. Nous espérons que sa diffusion suscitera l'attention de nombreux collègues et les incitera à rejoindre un réseau en lien avec leur activité scientifique, voire à proposer de nouveaux GDR. Ils veilleront, dans ce cas, à placer leur projet à l'intersection des champs disciplinaires et auront l'ambition d'y faire se développer une activité inédite.

En somme, les GDR nous apparaissent comme le lieu où s'imaginent les futurs axes de recherche, et l'INC est heureux de soutenir celles et ceux qui inventent et évaluent, pour la communauté de la chimie française, la fécondité des interfaces de demain.

Jacques Maddaluno
Directeur de l'Institut de chimie du CNRS (INC)

GDR AIM

Agents d'imagerie moléculaire

OBJECTIFS



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

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

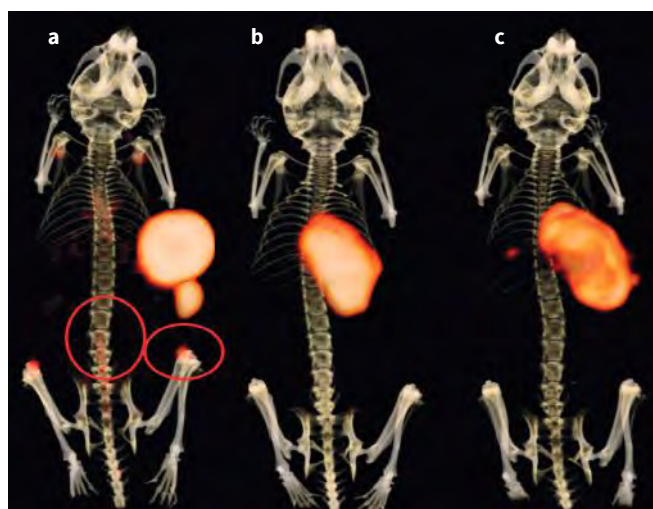
L'objectif du GDR AIM est de fédérer tous les groupes de recherche français développant des outils de chimie pour l'imagerie. Leurs compétences complémentaires permettront d'identifier et de lever les verrous et défis scientifiques pour aider au développement de sondes

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.

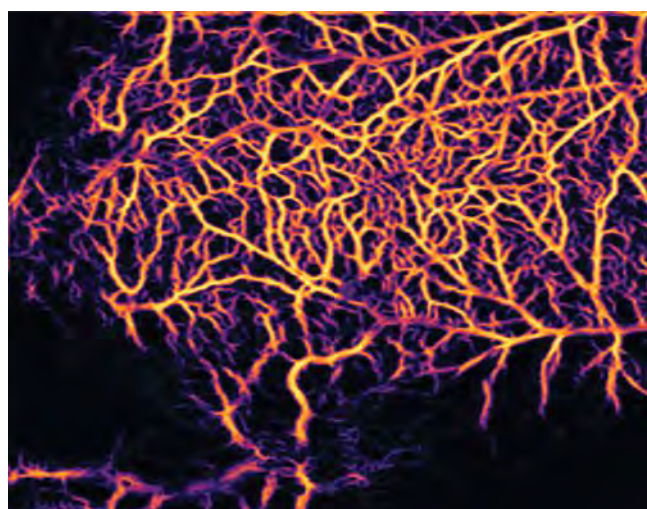
THÉMATIQUES

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



© Franck Denat, ICMUB Dijon

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



© Xavier Le Guevel, IAB Grenoble

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.

250 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 50 LABORATOIRES

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 radiotraceurs, 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

Éva Jakab Toth (CBM Orléans)
eva.jakabtoth@cncrs-orleans.fr

Directeur adjoint

Franck Denat (ICMUB Dijon)
franck.denat@u-bourgogne.fr

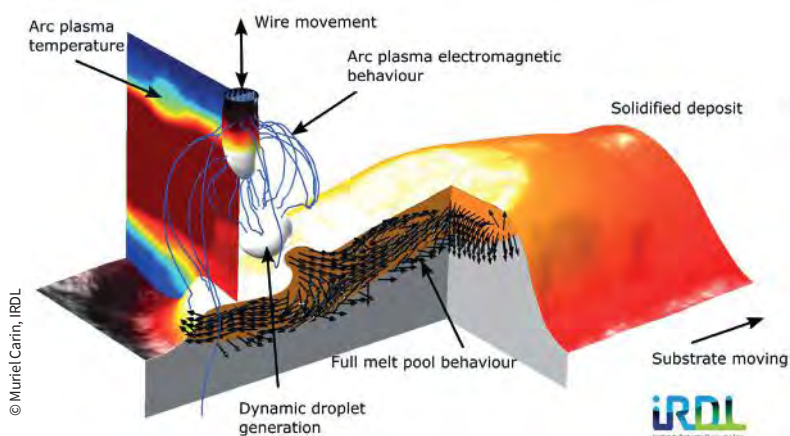
<http://gdraim.cncrs-orleans.fr>



GDR ALMA

Alliages métalliques par/pour la fabrication additive

OBJECTIFS



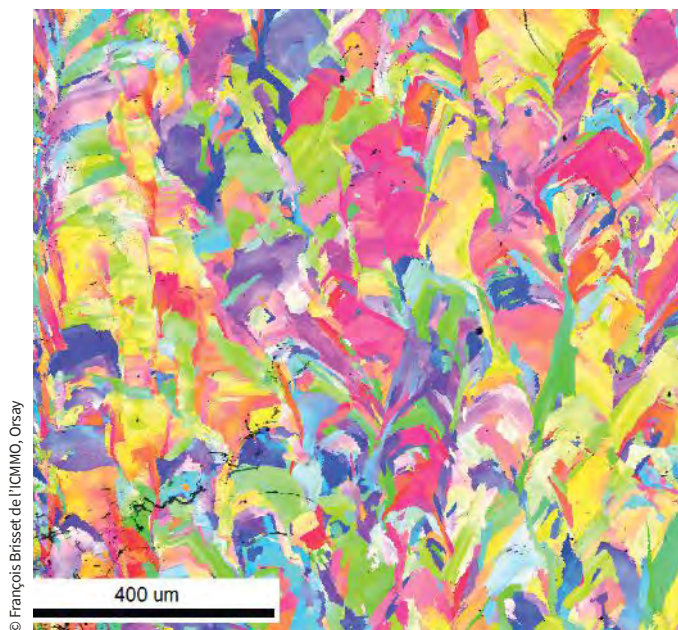
Modélisation multiphysique 3D du procédé WAAM.

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 :

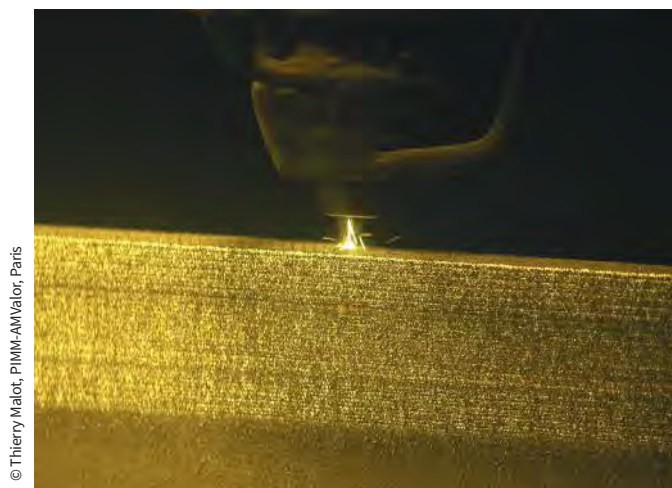
- faire émerger des projets novateurs et transversaux aux frontières des propriétés conventionnelles des alliages obtenus par voie classique/traditionnelle ;
- recenser et organiser les plateformes expérimentales en favorisant les recherches académiques amont ;
- former les jeunes chercheurs en science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

THÉMATIQUES

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



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



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

245 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 34 LABORATOIRES

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 structurelles ou fonctionnelles originales, suite à la 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

Directeur adjoint

Patrice Peyre (PIMM, Paris)
patrice.peyre@ensam.eu

<https://alma.cnrs.fr>

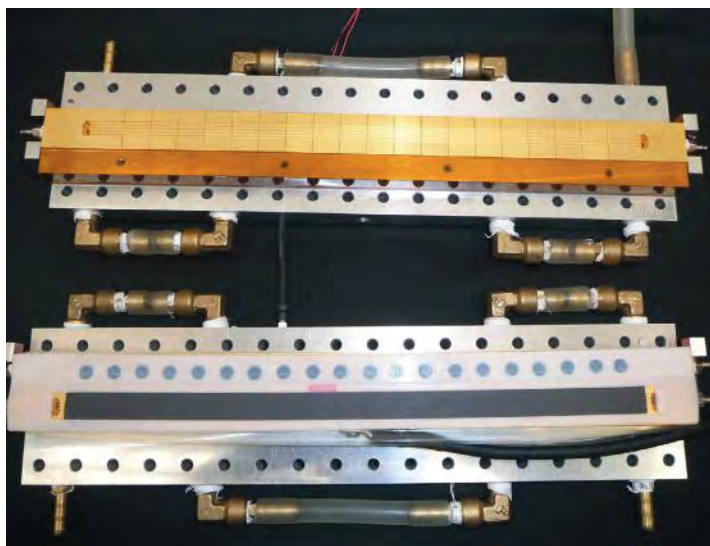
GDR REDOXFLOW

Batteries redox flow

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 synergies 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 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.



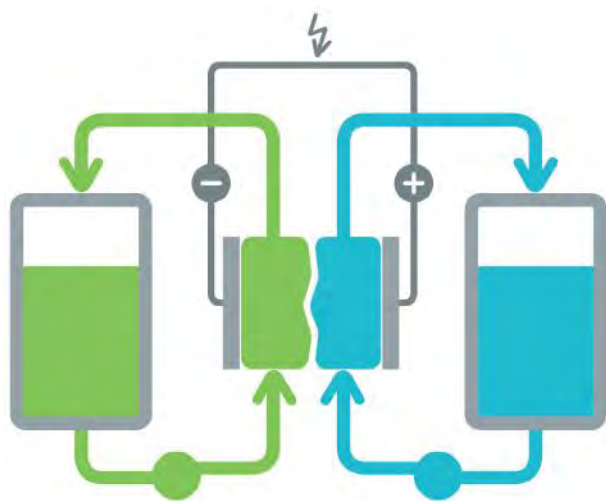
© Jérôme Dillet, LEMTA/INSIS/CNRS

Cellule segmentée développée au LEMTA.

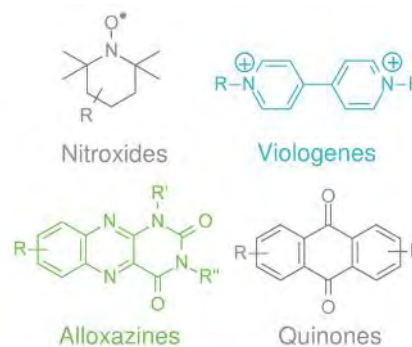
THÉMATIQUES

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

© Christine Wetz



Représentation schématique d'une batterie redox flow.



© Mael Penhoat, MSAP/Université de Lille

Familles de molécules organiques pour électrolytes.

100 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 20 LABORATOIRES ET ENTREPRISES

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 chaleurs 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.

CONTACT

Directeur

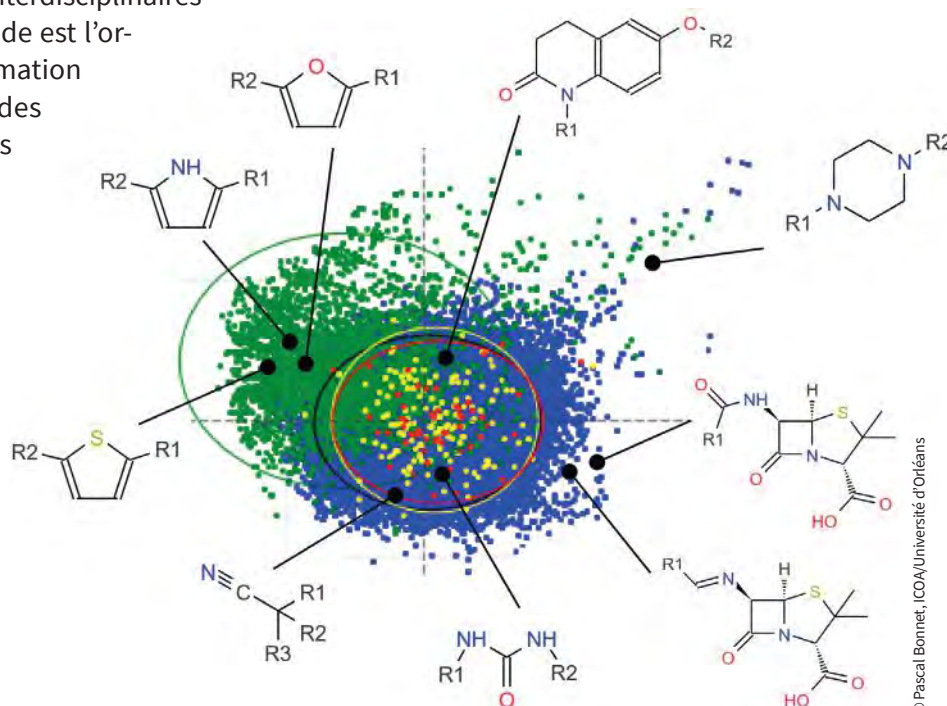
Mathieu Etienne (LCPME Nancy)
mathieu.etienne@univ-lorraine.fr

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

OBJECTIFS

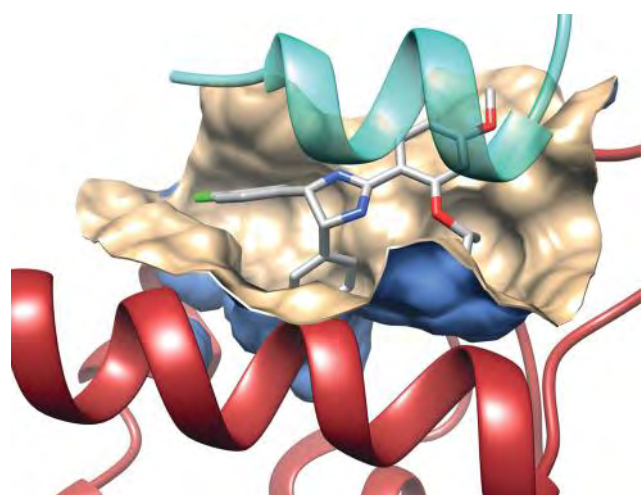
La mission du GDR BigDataChim est de promouvoir et d'animer des activités de recherche interdisciplinaires en chimoinformatique. L'objet d'étude est l'organisation et la recherche de l'information chimique ainsi que l'identification des relations entre structures chimiques et propriétés.

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



Prédire les interactions moléculaires.

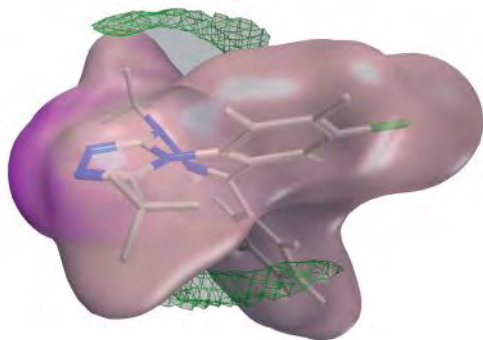
THÉMATIQUES

- 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

90 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 29 LABORATOIRES

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.

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

Directrice

Dominique Douguet (IPMC Valbonne)
douguet@ipmc.cnrs.fr

Directeur adjoint

Olivier Sperandio (Institut Pasteur Paris)
olivier.sperandio@pasteur.fr

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

GDR COSM'ACTIFS

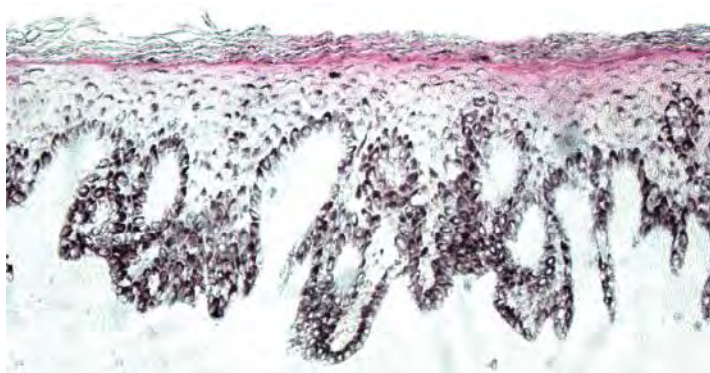
Bioactifs et cosmétique

OBJECTIFS

La mission principale du GDR COSM'ACTIFS est de favoriser l'avancée des connaissances dans des thématiques "cosmétiques" en lien avec les soins de la peau du visage et du corps, pour des propriétés diverses et variées (hydratante, raffermissante, amincissante, dépigmentante, antitaches, antirides, anti-âge, protection solaire, peaux grasses...).

Le périmètre scientifique du GDR a été défini pour répondre plus particulièrement aux défis scientifiques suivants :

- l'innovation en actifs et ingrédients sur la base d'une valorisation durable de la biodiversité ;
- l'innovation en formulation et vectorisation ;
- l'innovation en nouveaux outils biologiques et technologiques au service d'une meilleure connaissance de la peau saine.



© courtoisie Groupement de recherche Cosm'actif

Une action sur la peau.

THÉMATIQUES

- Sourcing : bioactifs/ ingrédients
- Formulation et vectorisation
- Cibles et modèles biologiques
- Innocuité et conservation



Bioproduction d'actifs.

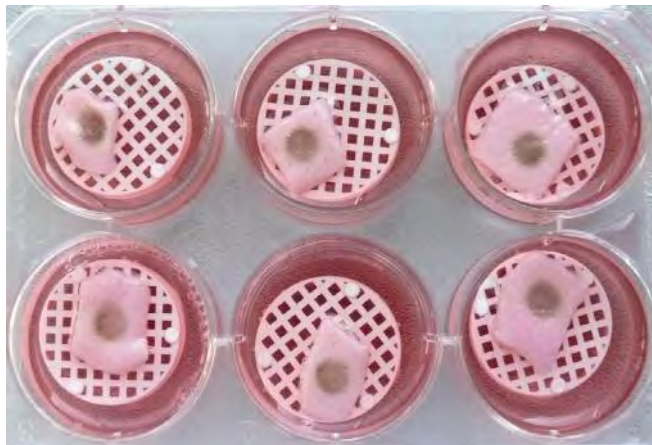
© Groupement de recherche Cosm'actif

250 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 48 LABORATOIRES

PROSPECTIVES

Après une première période de 4 ans où la mission principale a été de fédérer et de donner de la visibilité aux équipes, le GDR veut maintenant aller plus loin dans la dynamique initiée. Suite à des événements organisés lors de ces dernières années (table ronde lors des journées nationales, enquête industrielle) il est ressorti les attentes suivantes :

- besoins académiques : connaissances mutuelles, support industriel pour les expérimentations, identification des besoins industriels ;
- besoins industriels : connaissances des équipes, avoir des points de contacts, veille technologique, expérimentations ;



© courtoisie Groupement de recherche Cosm'actif

Des explants de peau.

La présence de représentants de partenaires industriels sera donc encouragée et attendue lors de ce renouvellement. Le GDR proposera donc la création d'un club des partenaires industriels pour mener des actions favorisant les échanges entre ces deux mondes et répondre ainsi à leurs attentes. En adhérant à ce club, les partenaires industriels pourront établir un dialogue privilégié avec les équipes de recherche, faire une veille sur les thématiques scientifiques et de transfert technologique,

participer au montage de projets pour répondre à des appels à projets, acquérir et partager des compétences techniques, établir une relation privilégiée avec les diplômés formés au sein des laboratoires de recherche aux technologies modernes et innovantes : masters spécialisés, jeunes doctorant·e·s et/ou ingénieur·e·s ou post-doctorant·e·s (avec plus d'expérience).

Un effort particulier sera aussi mis sur le développement de thématiques de recherches transversales aux 4 axes du GDR et plus particulièrement concernant le développement d'ingrédients cosmétiques multifonctionnels, les procédés durables et les interactions microbiote cutané/cosmétiques et environnement. Ceci permettra de répondre de manière compétitive aux appels à projets nationaux (ANR) ou européens au travers de consortiums académiques ou mixtes académiques/industriels.

CONTACT

Directeur

Richard Daniellou (ICOA Orléans)

richard.daniellou@univ-orleans.fr

www.cosmactifs.cnrs.fr

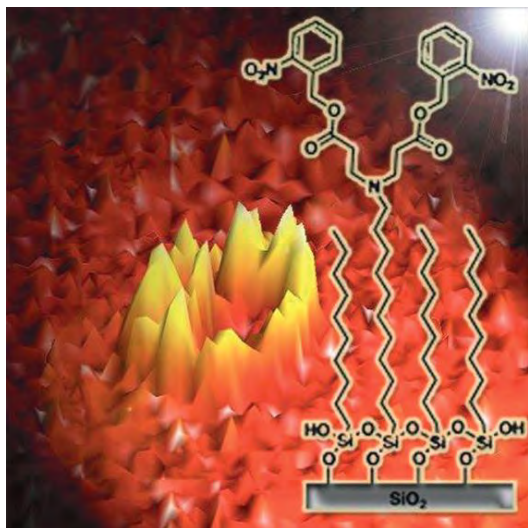
cnrs **GDR** Groupement
de recherche
COSM'ACTIFS Bioactifs
et cosmétique

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.

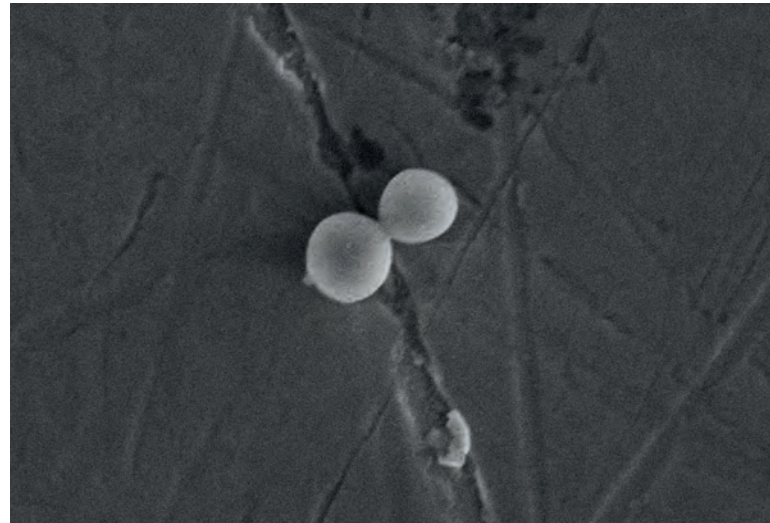
Le GDR B2i a pour vocation d'inciter les synergies entre les différentes disciplines afin de permettre l'émergence de projets innovants et transversaux. Face aux défis actuels de santé publique, les dispositifs médicaux (biomatériaux, dispositifs implantables), les biopuces, les *Lab-on-a-chip*, les 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 SiO₂

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



© Vincent Humblot, Institut de recherche femto-st

Staphylococcus aureus (staphylocoque doré) @ surface de titane

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



© Grand Angle Santé 2018-2019

Prothèse totale de hanche # titane .

200 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 50 ÉQUIPES

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 par 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 thérapeutique 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·SE·S en créant un club des doctorant·e·s et post-doctorant·e·s qui leur permettraient 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 2 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

Directeurs adjoints

Yoann Roupioz (SyMMES Grenoble)
yoann.roupioz@cea.fr

Luc Vellutini (ISM Bordeaux)
luc.vellutini@u-bordeaux.fr

https://events.femto-st.fr/GdR_B2i/fr

GDR BIOMIM

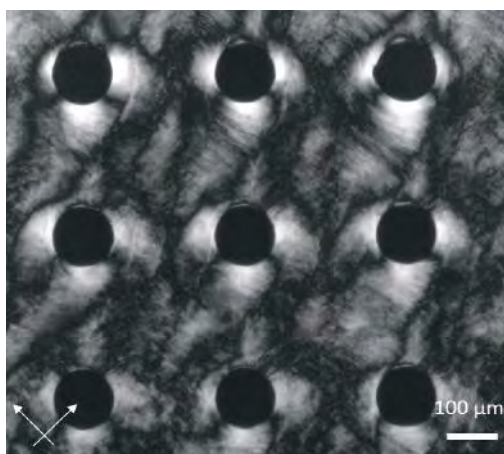
Biomimétisme et bioinspiration

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

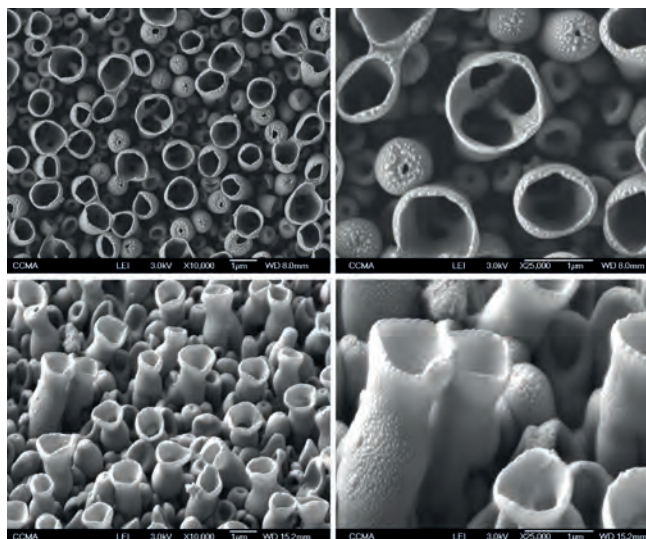
des solutions inspirées de la nature. Il vise également à créer et valoriser une cartographie sur les activités de recherches et initiatives françaises et en assurer la promotion et le rayonnement à l'international, devenir un appui en innovation pour les directions scientifiques, les organismes publics,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

© Nadine Nassif et Elora Bessot, Sorbonne université



Structuration de mésophases du collagène dans une chambre microstructurée mimétique de l'os compact.

© Thierry Darmanin, Univ. Côte d'Azur et Anne Gaucher, Institut Lavoisier de Versailles



De la conception d'un objet moléculaire polyaromatique à son greffage par électropolymérisation.

© Pierre Moretto, Université de Toulouse



Reconstruction 3D de *Messor barbarus* obtenue avec un scan de micro-tomographie informatisée.

THÉMATIQUES

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

699 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 92 LABORATOIRES

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 de nouveaux systèmes de détection basés sur des approches biomimétiques et/ou bio-inspirées permettent de grands progrès pour améliorer 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-compartmentées 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 telles 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.

CONTACT

Directeur

Frédéric Guittard (NICE Lab Nice)

Frederic.GUITTARD@univ-cotedazur.fr

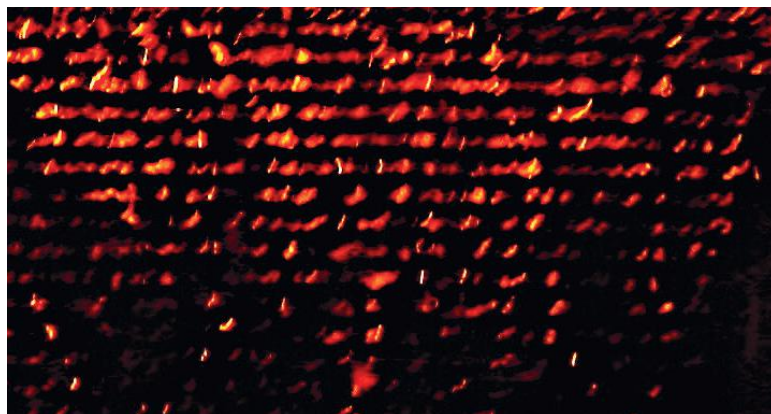
<https://www.gdr-biomim.com>

GDR CAVITATION

OBJECTIFS

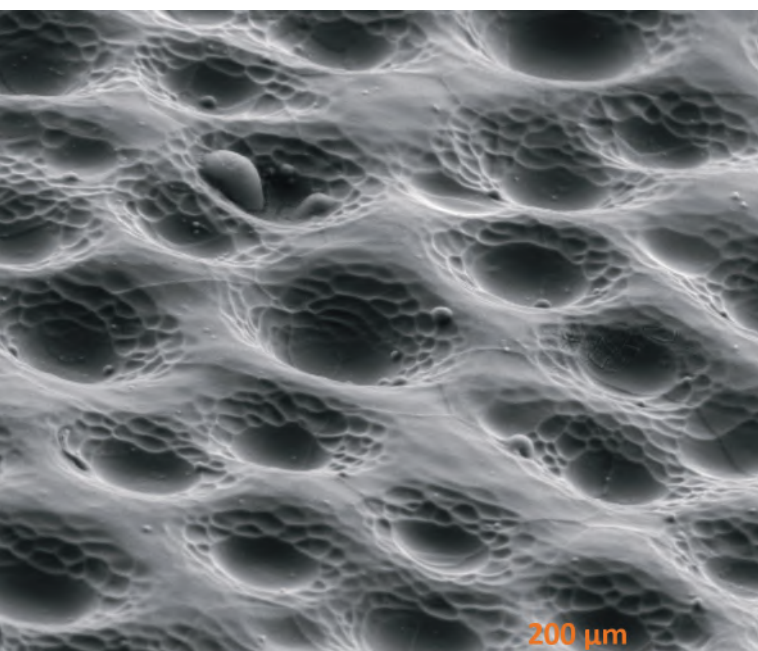
Les missions principales du GDR CAVITATION sont :

- 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.



© Loïc Hallez, UTINAM Besançon

Bulles de cavitation dans une onde stationnaire à 500 kHz.

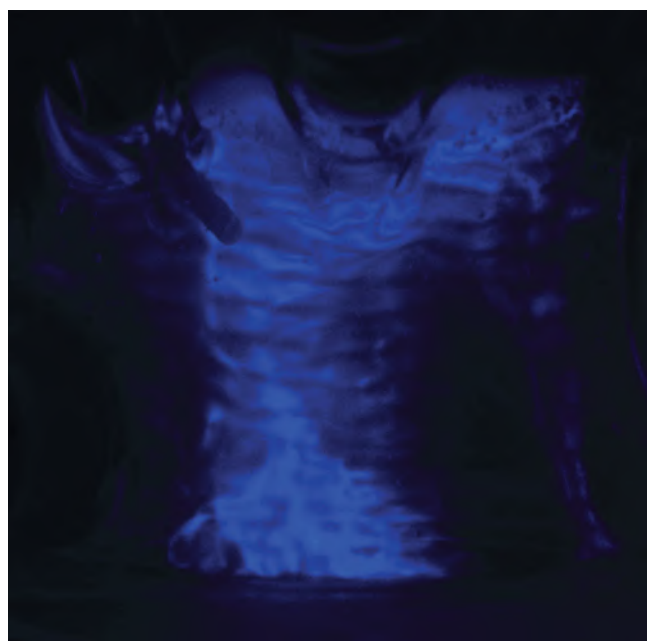


© Sergueï Nikitenko, ICSM © 2018 Elsevier

Surface de magnésium après traitement ultrasonore.

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



© Sergueï Nikitenko, ICSM © 2018 Elsevier

Sonochimiluminescence.

120 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 33 LABORATOIRES

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, permettant l'amélioration de la sélectivité et des rendements ainsi que de 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 scientifique 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

Sergueï Nikitenko (ICSM Marcoule)
serguei.nikitenko@cea.fr

Directeur adjoint

Jean-Yves Hihn (UTINAM Besançon)
jean-yves.hihn@univ-fcomte.fr

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



GDR CHIRAFUN

Chiralité et multifonctionnalité

OBJECTIFS

Les objectifs du GDR CHIRAFUN sont :

- l'élaboration de systèmes moléculaires et supramoléculaires chiraux ;
- la chiralité sera utilisée 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.

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

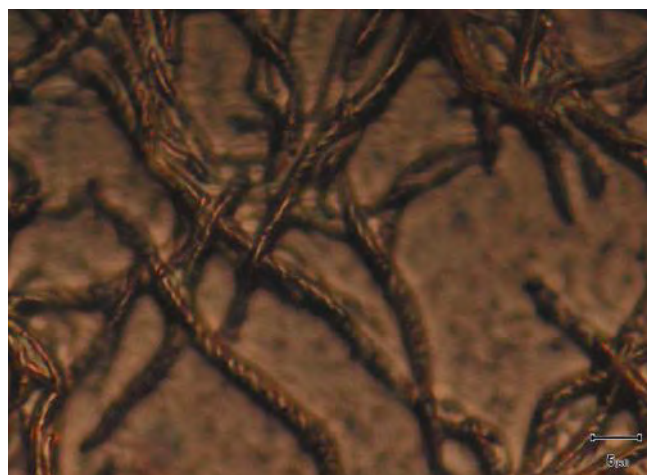
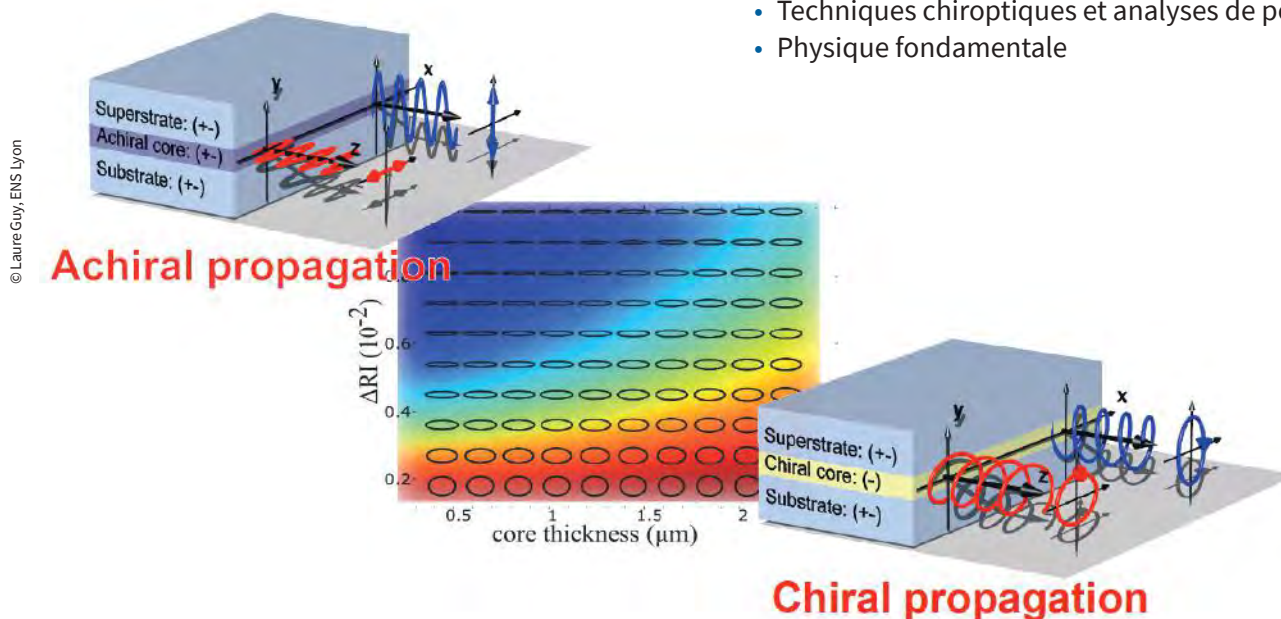


Image par microscopie optique de fibres supramoléculaires homochirales électroactives d'un composé tris(TTF).

© Narcis Avarvari, MOJTECH Arjoui

THÉMATIQUES

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

108 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 29 LABORATOIRES

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

Directeur et Directrice adjoints

Narcis Avarvari (MOLTECH-Anjou Angers)

narcis.avarvari@univ-angers.fr

Laure Guy (LCH Lyon)

laure.guy@ens-lyon.fr

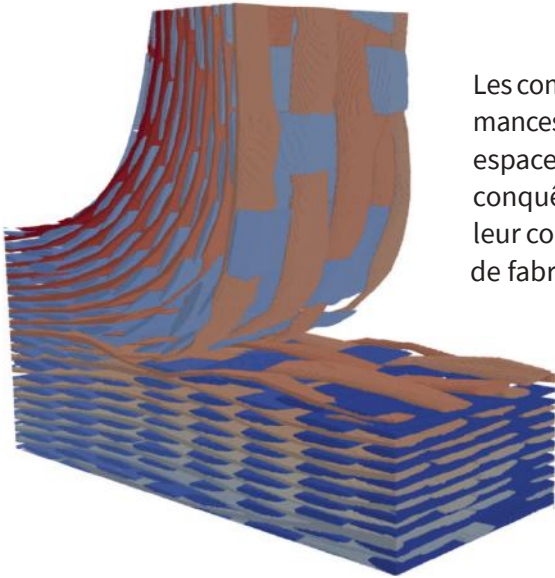
<https://chirafun.sciencesconf.org>

GDR (CMC)²

Composites à matrice céramique : conception, modélisation, caractérisation

OBJECTIFS

© Jean Bénézech et Guillaume Couégnat, LCTS Bordeaux



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)² 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.

THÉMATIQUES

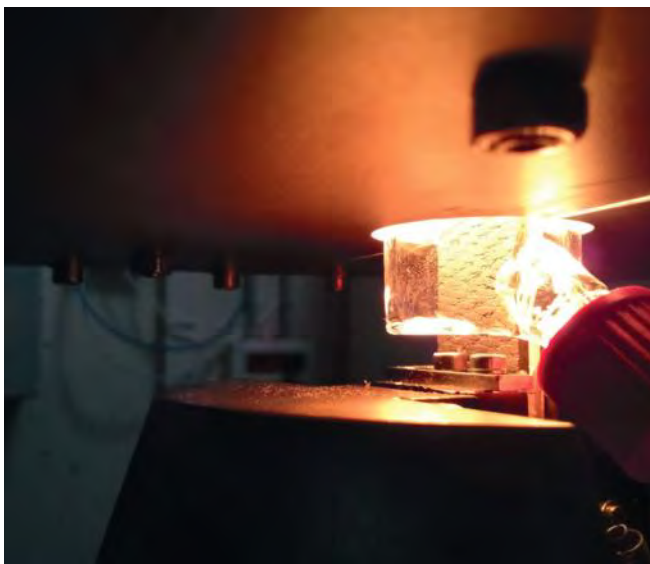
Vers des CMC innovants, moins chers et plus rapides à produire :

- 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

© Gérard L. Vignoles, LCTS Bordeaux



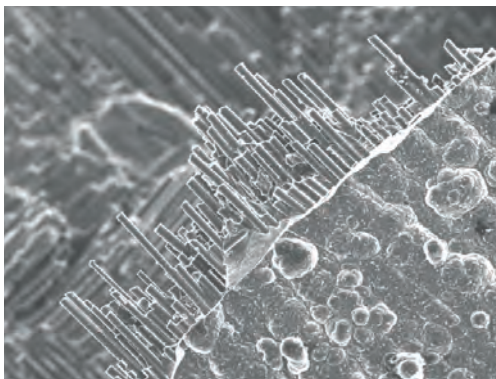
Test mécanique sur CMC à 800°C sous gaz oxydants.

165 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 24 LABORATOIRES

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 (au sens large) 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*.



© Pascal Reynaud, INSA Lyon

Faciès de rupture d'un composite SiC/SiC.

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. De plus, 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 connaissance renforcée 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

Directeur adjoint

Pascal Reynaud (MATEIS, Lyon)
pascal.reynaud@insa-lyon.fr

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

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

GDR THERMOBIO

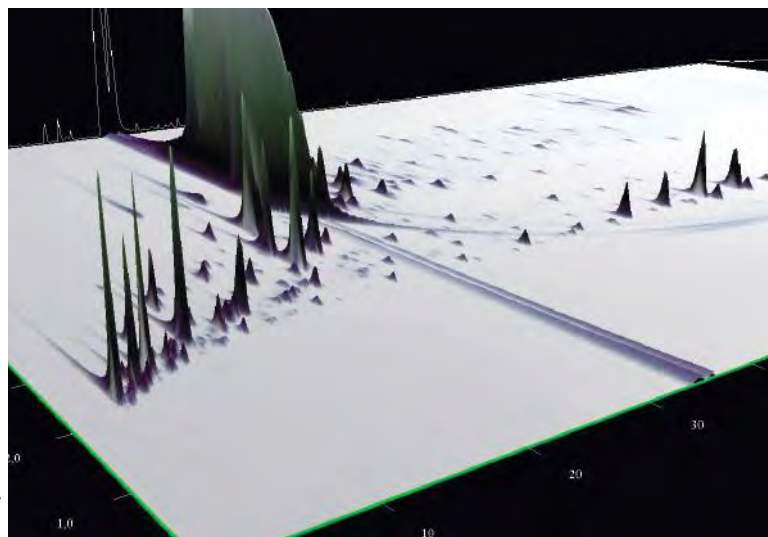
Conversion thermochimique de la biomasse et des déchets

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).



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

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



Pilote gazéification.

Biomasses lignocellulosique et algale.



90 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 35 LABORATOIRES

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, Futurool, 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 réac-

tionnels 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 des territoires voire globale.

CONTACTS

Directrice

Dorothee Laurenti IRCELYON Lyon
dorothee.laurenti@ircelyon.univ-lyon1.fr

Directeur adjoint

Anthony Dufour (LRGP Nancy)
anthony.dufour@univ-lorraine.fr
<http://thermobio.cnrs.fr>



GDR CONCORD

Couplage mécanique oxydation diffusion

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 soit 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

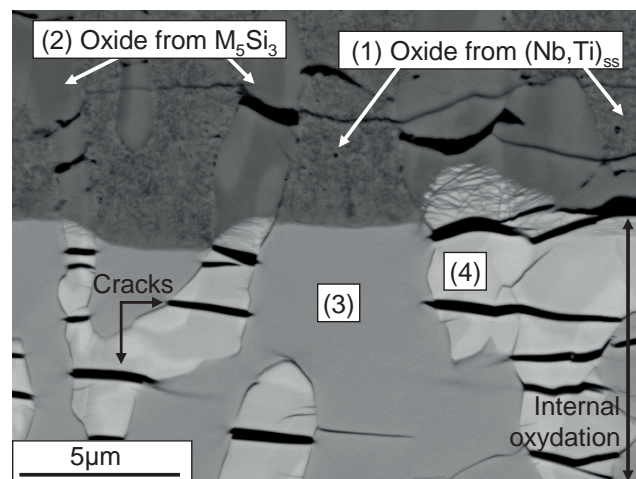


© Tom Sanviemvongsak, Thèse CIRIMAT 2020, Toulouse INP

Module de flexion à haute température.

THÉMATIQUES

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



© Stéphane Mathieu, Institut Jean Lamour, Univ. Lorraine

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

67 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 15 LABORATOIRES

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

Directrice adjointe

Marion Risbet (Roberval Compiègne)
marion.risbet@utc.fr

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

GDR HYDRATES

Hydrates de gaz

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.

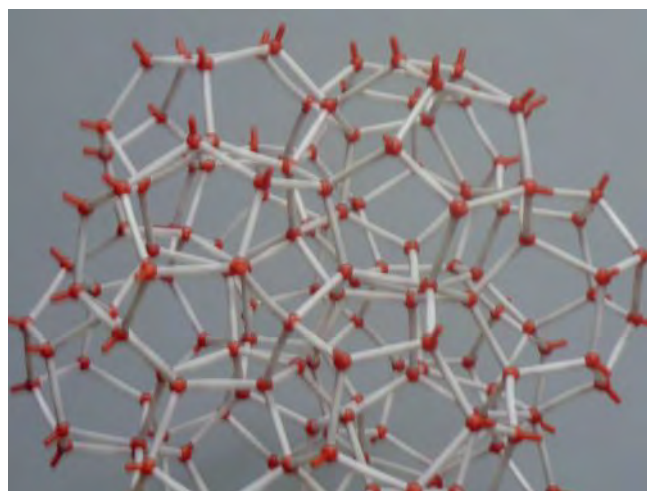


© Arnaud Desmedt, ISM - CNRS - Univ. Bordeaux

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

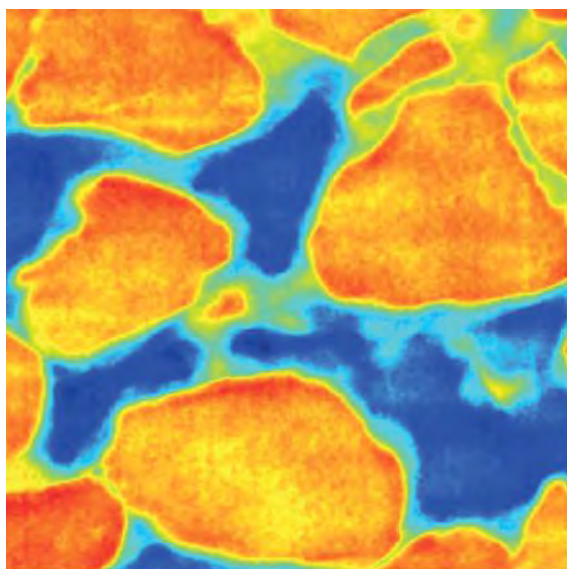
THÉMATIQUES

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



© Sylvain Picaud, UTINAM - CNRS-Univ. Besançon

Représentation des nanocages aqueuses d'un hydrate de gaz.



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

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

103 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 29 LABORATOIRES

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, (méso)poreux, etc.). Ces interactions contrôlent ainsi la répartition des hydrates dans les sédiments porteurs, ou dans d'autres substrats (méso)poreux. 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 connais-

sances 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

Directeurs adjoints

Livio Ruffine (IFREMER Brest)
livio.ruffine@ifremer.fr

Daniel Broseta (LFCR Pau)
daniel.broseta@univ-pau.fr

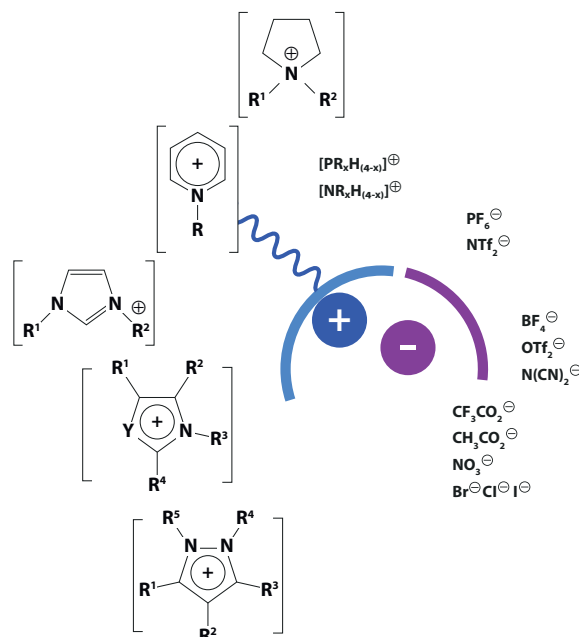
<http://hydrates.cnrs.fr>

GDR LIPS

Liquides ioniques et polymères

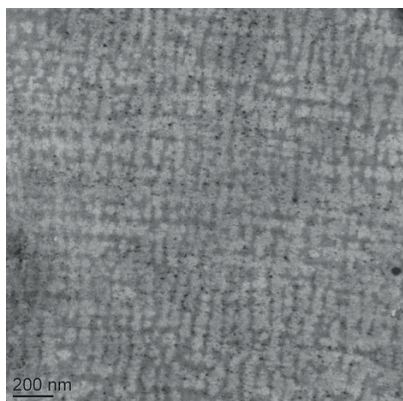
OBJECTIFS

Le GDR LIPS, créé depuis 2013 et renouvelé en 2017, affiche une volonté forte de mettre en place un lieu d'échanges rassemblant une communauté interdisciplinaire, dynamique et visible au niveau national, européen et international pour répondre aux évolutions du domaine des liquides ioniques (LI) et des polymères. Le GDR LIPS réunit des acteurs de la recherche académique et industrielle sur des objectifs d'animation et de prospective. L'objectif premier du GDR est de mettre en œuvre un effort d'animation conséquent à travers l'organisation de journées scientifiques et l'animation d'une plateforme en ligne. Le second objectif vise la formation des jeunes chercheurs via l'organisation d'écoles d'été et l'attribution de bourses à la mobilité. Enfin, des appels à projets sont mis en place annuellement pour faire émerger des approches pertinentes et originales de recherche et de développement.



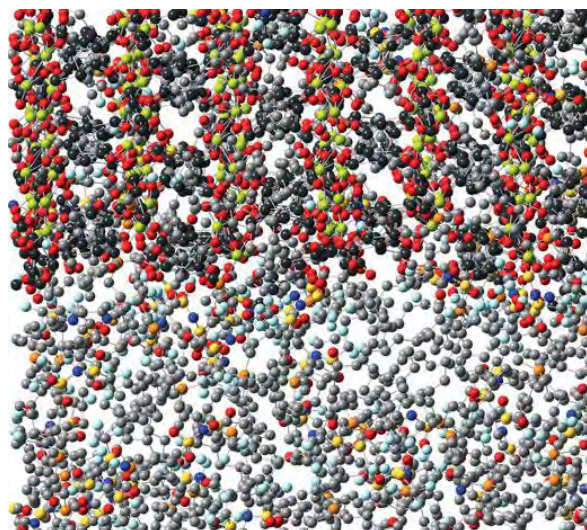
Grande versatilité des combinaisons (cations, anions) des liquides ioniques.

© Jannick Duchet Rumeau, INSA Lyon



Association de liquides ioniques et d'une matrice polymère générant une structuration.

Réprésentation *in silico* du liquide ionique trihexyltetradecylphosphonium bis(trifluoromethylsulfonyl) imide à la surface d'un solide poreux.



© M. Costa Gomes, A. Padua, Laboratoire de Chimie/ENS Lyon

150 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 40 LABORATOIRES

PROSPECTIVES

Évolution du GDR vers un Réseau de recherche international (IRN) compte tenu de :

L'ATTRACTIVITÉ CROISSANTE DE LA THÉMATIQUE "LIQUIDES IONIQUES & POLYMÈRES"

- Nombre de publications qui évolue toujours à une rapidité prodigieuse témoignant du foisonnement scientifique du domaine.
- Intérêt des jeunes chercheurs pour cette thématique compte tenu de leur participation aux écoles d'été.

CRÉER UNE COMMUNAUTÉ INTERDISCIPLINAIRE

De nombreuses questions scientifiques encore non résolues nécessitent de favoriser les rapprochements scientifiques entre les deux communautés :

- La synthèse de liquides ioniques conçus à dessein pour le design d'interactions contrôlées. Si les liquides ioniques disponibles commercialement offrent déjà une grande diversité, la synthèse de liquides ioniques, conçus à dessein, reste d'un grand intérêt pour le design d'interactions contrôlées et l'utilisation des liquides ioniques en association avec un polymère pour une fonction donnée.

- Les phénomènes de structuration des LIs aux interfaces.

Si une compréhension fine des interactions liquides ioniques et polymères est incontournable pour une combinaison avisée, celle-ci passe forcément par une caractérisation *ad hoc* des interactions. Ainsi, la connaissance des techniques de caractérisation propres à chaque communauté polymériste ou chimiste des liquides ioniques devrait être mutualisée.

L'utilisation des liquides ioniques en tant que *processing aid* reste toujours un axe de recherche très développé pour la mise en œuvre des polymères (naturels et synthétiques) par "voie solvant" ou par "voie fondue". Les liquides ioniques sont avant tout des solvants, des agents compatibilisants et même plus récemment des

agents structurants. On constate des avancées importantes dans la construction des diagrammes de phase polymère/LI et polymère/LI/co-solvant.

Enfin, l'éco-toxicité des LIs est un axe de recherche émergent ces dernières années car ce nouveau concept implique la synthèse des liquides ioniques biosourcés, la régénération et recyclabilité des liquides ioniques et l'analyse du cycle de vie.

La synergie entre les deux communautés scientifiques doit être pérennisée et de nouvelles possibilités de carrière s'ouvrent aux jeunes scientifiques contribuant à leur insertion professionnelle.

L'ÉVOLUTION DU PÉRIMÈTRE GÉOGRAPHIQUE POUR ACCROÎTRE LA DIMENSION INTERNATIONALE DU GDR

Renforcer les actions d'ouverture vers l'Europe en pérennisant les actions collaboratives (invitations de conférenciers internationaux, écoles d'été internationales, accords bilatéraux ou multilatéraux avec les laboratoires internationaux).

CONTACTS

Directrice

Jannick Duchet-Rumeau (IMP Lyon)
jannick.duchet@insa-lyon.fr

Directrice adjointe

Margarida Costa-Gomes (LCH Lyon)
margarida.costa-gomes@ens-lyon.fr

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

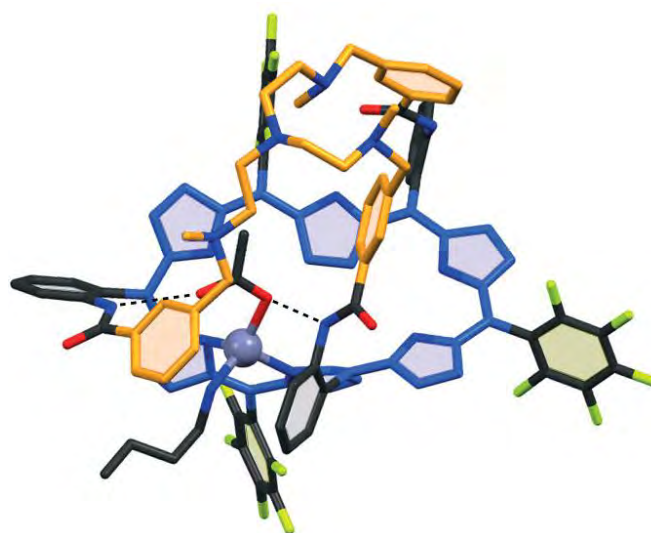
GDR MAPYRO

Macrocyces pyrroliques

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, chimie de coordination, chimie supramoléculaire, catalyse homogène et hétérogène, l'activation de petites molécules, électro- et la photoactivation.

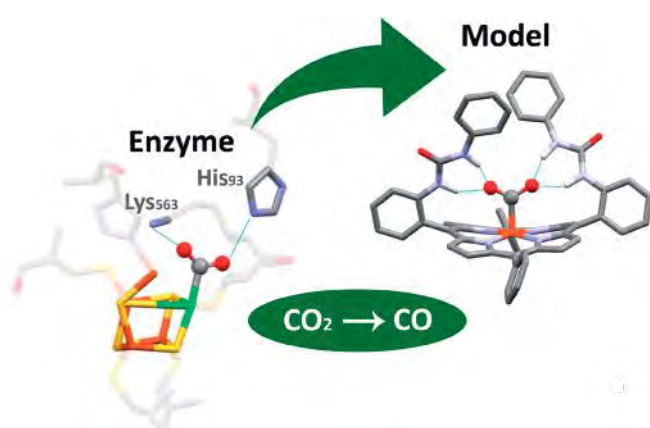
Le GDR permet un échange régulier des connaissances, apporte des solutions à des problématiques précises via des collaborations au cours desquelles des chercheurs peuvent se déplacer dans un laboratoire du groupement pour être formés à des techniques et/ou pratiques nouvelles.



Hexaphyrine chapeauté : métallorécepteur chiral et Möbius-aromatique.

© Stéphane Le Gac, CNRS/Université de Rennes 1

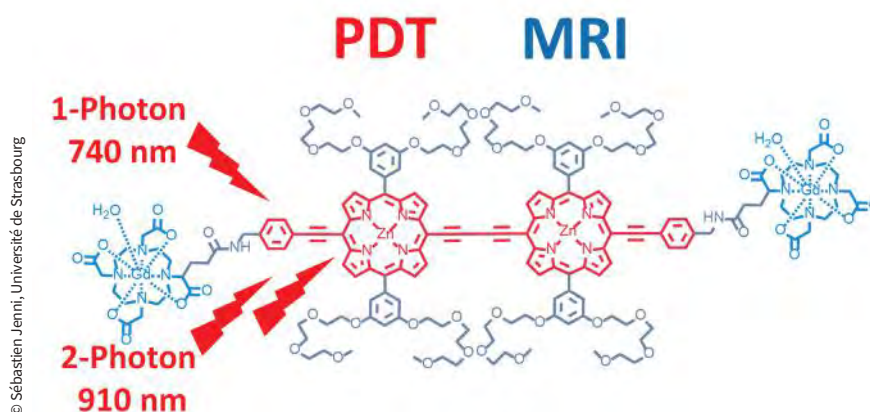
© Zakaria Halime, CNRS/Université Paris-Saclay



Réduction biomimétique du CO₂

THÉMATIQUES

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



© Sébastien Jenni, Université de Strasbourg

Bis-porphyrine fonctionnalisée : agent thérapeutique bimodal.

75 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 23 LABORATOIRES

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 coordiner 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

Bernard Boitrel (ISCR Rennes)

bernard.boitrel@univ-rennes1.fr

Directeurs adjoints

Claude Gros (ICMUB Dijon)

Claude.Gros@u-bourgogne.fr

Jean Weiss (Institut de Chimie Strasbourg)

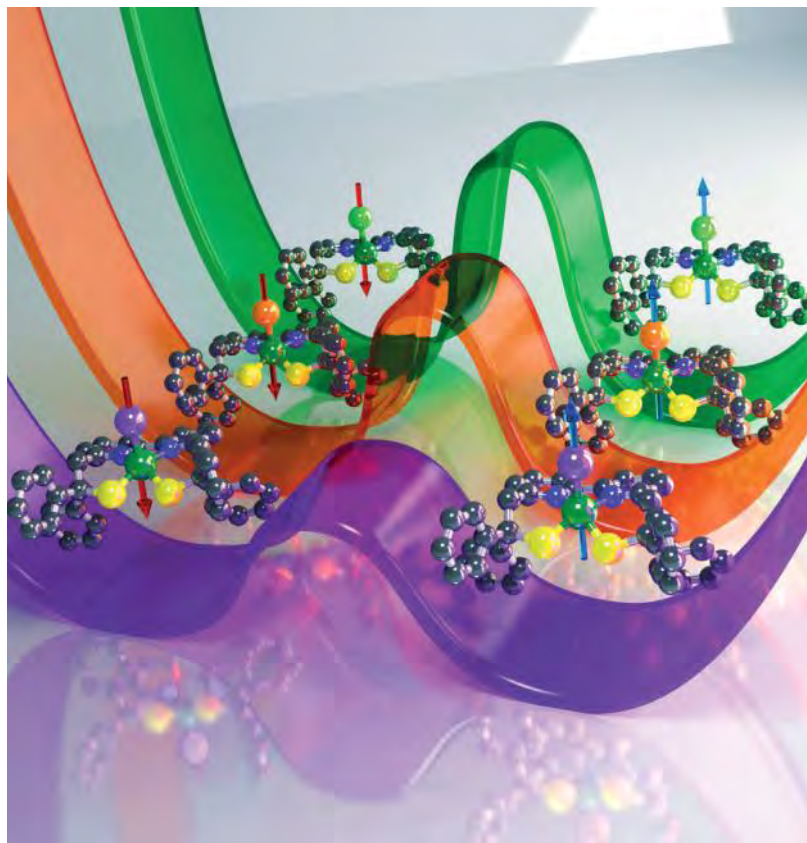
jweiss@unistra.fr

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



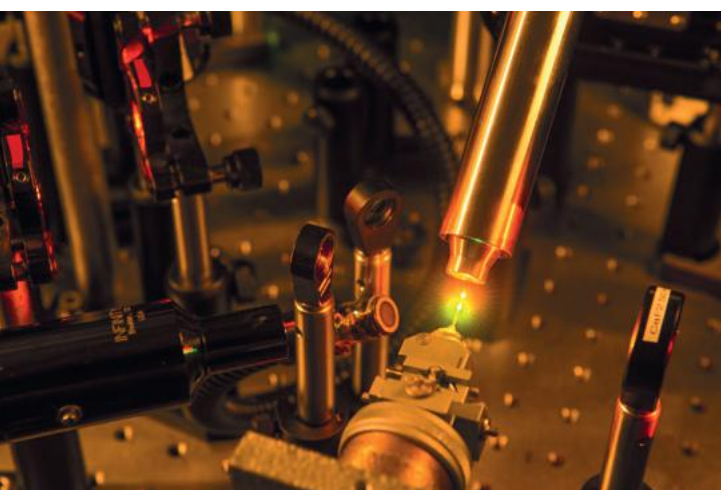
OBJECTIFS

Pour que les matériaux de demain prennent leur place dans le quotidien de chacun en y apportant de la souplesse, de la fonctionnalité, et de l'efficacité, il est crucial de concevoir dès aujourd'hui de nouvelles molécules fonctionnelles et d'étudier leur comportement. Avec la chimie de coordination au cœur de cette démarche, le GDR MCM2 rassemble des chimistes, physico-chimistes, théoriciens et physiciens issus des laboratoires et grands instruments français au sein d'une même communauté pour le développement de matériaux magnétiques et commutables à base moléculaire. Ces nouveaux objets (multi) fonctionnels sont d'intérêt en tant qu'agents de contraste IRM, pour le stockage optique et magnétique de l'information, les pigments intelligents, l'électronique et la spintronique moléculaire...



© Communiqué de presse INC/INP Orto 2013

Ingénierie moléculaire et calculs théoriques pour le contrôle de l'anisotropie magnétique de molécules-aimants.



© Communiqué de presse CNRS 2013

Cristallographie et optique résolues en temps.

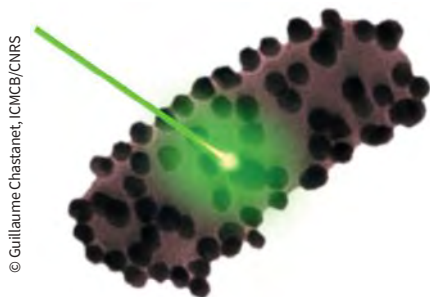
THÉMATIQUES

- Ingénierie moléculaire
- Mise en forme de matériaux moléculaires
- Multifonctionnalité et matériaux hybrides
- Électronique et spintronique moléculaires
- Instrumentations multi-échelles et multi-contraintes
- Modélisation multi-échelles

200 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 51 LABORATOIRES

PROSPECTIVES

On observe actuellement un magnifique essor du magnétisme et de la commutation moléculaire auquel la communauté du GDR participe grandement. Ce domaine de recherche se diversifie tant par ses approches de synthèse de matériaux multifonctionnels, que par la nature des processus physiques à l'œuvre de plus en plus complexes. Les applications réelles sont chaque jour plus proches avec de nouveaux aimants à température ambiante, les couplages magnéto-électriques, la ferro-électricité, les pigments intelligents, la biologie, les dispositifs électroniques commutables, la spintronique moléculaire... Tous ces développements ont bénéficié du renforcement des interactions entre chimistes, physiciens et théoriciens au cœur de ce GDR. Afin de poursuivre cette dynamique, il est primordial à la fois de maintenir ces échanges interdisciplinaires et d'initier et de développer en parallèle le dialogue avec des communautés voisines. Ces échanges doivent permettre aux chimistes de concevoir de nouveaux matériaux (multi)fonctionnels, hybrides, aux propriétés ciblées et contrôlées, aux physiciens d'explorer de nouvelles topologies et nouveaux phénomènes, avec le soutien des théoriciens pour modéliser et prédire les comportements.



Photocommutation de nanocomposites.

La structuration de cette communauté, promouvant ces dialogues pluridisciplinaires, a débuté au début des années 2000. Après presque 20 ans d'évolution,

cette structuration va être pérennisée via la création d'une association française de magnétisme moléculaire (AM²). Les objectifs seront multiples. Centrées sur les échanges pluridisciplinaires, différentes actions seront menées (écoles, *workshop*, mobilités, bourses, journées scientifiques, rencontre avec d'autres communautés...) pour porter toujours plus en avant cette communauté. Une préoccupation importante portera sur le maintien du lien entre développements fondamentaux et appliqués. Les atouts de l'approche moléculaire seront implémentés dans des domaines encore peu explorés qui ont émergés ces dernières années. Les rencontres avec d'autres expertises permettront un enrichissement mutuel dans l'élaboration, la caractérisation et la compréhension des matériaux qui seront demain au quotidien dans nos technologies.

CONTACTS

Directeur

Guillaume Chastanet (ICMCB Bordeaux)
guillaume.chastanet@icmcb.cnrs.fr

Directeurs adjoints

Boris le Guennic (ISCR Rennes)
boris.leguennic@univ-rennes1.fr

Sébastien Pillet (CRM2 Nancy)
sebastien.pillet@univ-lorraine.fr

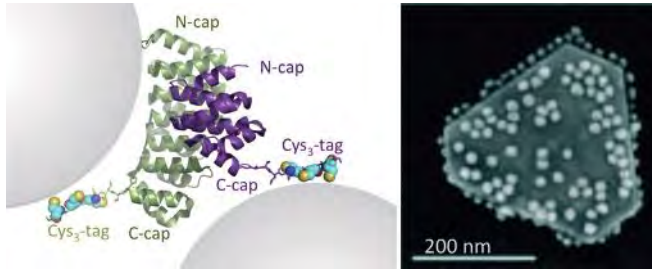
<http://www.gdr-mcm2.cnrs.fr>

GDR MÉDYNA

Mécanismes et dynamiques de formation des assemblages protéiques auto-organisés

OBJECTIFS

© Agathe Urvoas, I2BC, Paris-Saclay
© 2016 American Chemical Society



Protéines artificielles obtenues par biologie combinatoire et évolution dirigée pour créer de la reconnaissance moléculaire spécifique. À droite, application à la morphosynthèse de nanocristaux.

Les objectifs du GDR MéDyna sont :

- fédérer les équipes françaises qui s'intéressent aux mécanismes et à la dynamique de formation d'assemblages auto-organisés de protéines et d'assemblages auto-organisés mixtes (protéines-membranes, protéines-acides nucléiques, peptido-mimétiques ...) selon des perspectives et méthodologies très diverses ;
- bâtir un langage commun afin de bénéficier de toutes les compétences issues de la biologie, de la biophysique,

de la chimie, de la physique et des mathématiques pour la compréhension et la maîtrise de ces mécanismes d'assemblages protéiques ;

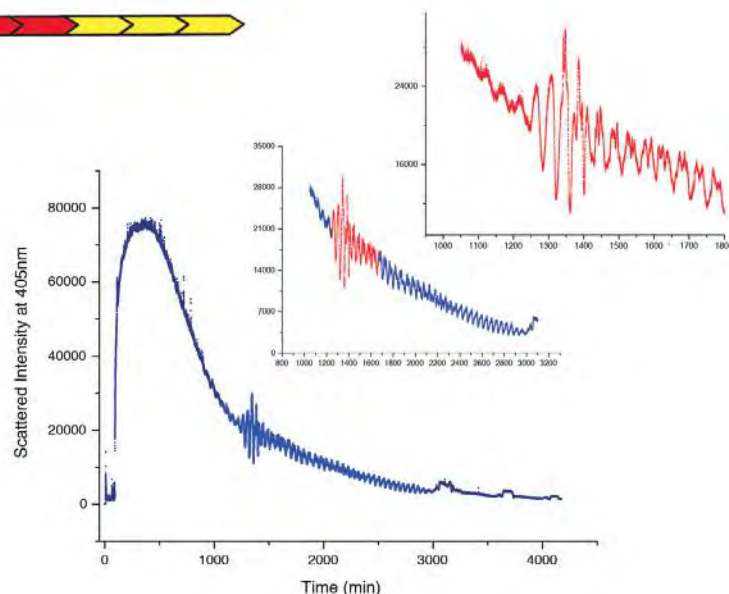
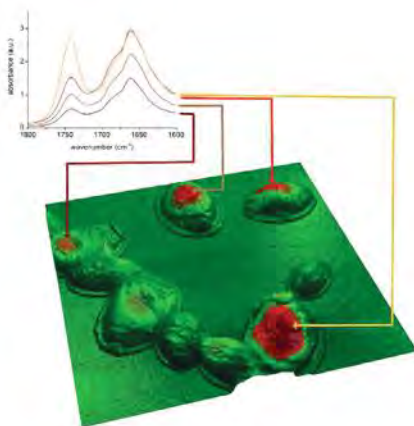
- fédérer l'émergence de projets de recherche innovants et interdisciplinaires ;
- structurer un réseau national interdisciplinaire qui servira aux chercheurs qu'ils soient en début de carrière (doctorant-e-s et post-doctorant-e-s notamment) ou établis.

THÉMATIQUES

- Biochimie, biophysique et physico-chimie des assemblages protéiques
- Modélisation mathématique des processus d'assemblage
- Biomatériaux protéiques et protéo-inspirés, systèmes auto-assemblés biomimétiques
- Biologie structurale, modélisation moléculaire et simulation des assemblages



© Ariane Deniseit, I2BC, Paris-Saclay
© 2017 American Chemical Society



Fibres de protéine prion (PrPC) caractérisées par microscopie de force atomique couplée à la spectroscopie infrarouge (à gauche). Leur cinétique de désassemblage (droite).

160 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 35 LABORATOIRES

PROSPECTIVES

Le GDR MéDynA rassemble des chercheurs de multiples disciplines pour une compréhension globale de ce type de processus non linéaire, c'est-à-dire dont les produits ne découlent pas systématiquement d'un état précédent unique. Chacune des disciplines apporte son expertise :

LES BIOLOGISTES apportent les systèmes biologiques protéiques et leur richesse de possibilités d'auto-assemblages ainsi que les questions biologiques pertinentes ;

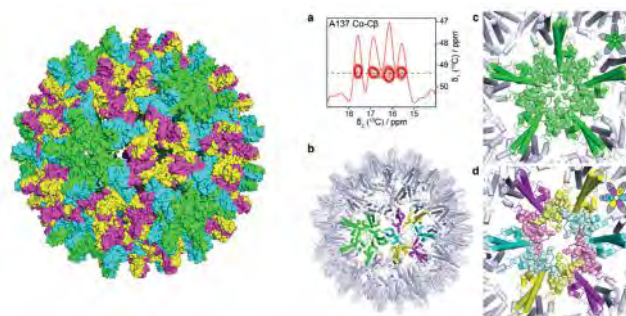
LES CHIMISTES ET LES BIOCHIMISTES apportent leur expérience pour la caractérisation expérimentale des assemblages qui peuvent être isolés et stabilisés : le(s) point(s) d'arrivée des processus d'auto-assemblage, et les intermédiaires dont la durée de vie peut être allongée grâce à la modulation des processus par les conditions expérimentales ;

LES BIOLOGISTES STRUCTURAUX apportent leur expérience pour la caractérisation à l'échelle atomique des assemblages à l'équilibre et des intermédiaires de durée de vie longue ;

LES PHYSICIENS, PHYSICOCHIMISTES ET BIOPHYSICIENS apportent leur expertise pour la caractérisation rigoureuse des processus physiques sous-jacents et la génération de modèles physiques prédictifs qui en rendent compte ;

LES MATHÉMATIENS apportent la modélisation des processus, basée sur l'assimilation de toutes les données expérimentales obtenues par les autres disciplines, mais aussi la modélisation moléculaire à l'interface chimie/biologie structurale.

MéDynA crée une communauté scientifique multidisciplinaire autour des mécanismes et de la dynamique des assemblages de protéines afin d'en comprendre et d'en maîtriser la formation aux niveaux moléculaire et physicochimique. Pour les jeunes chercheuses et chercheurs, mais aussi pour les seniors, ce sera le point de départ pour la création d'un réseau national autour de cette thématique et de la découverte de l'importance de travailler avec les scientifiques de différentes disciplines



Capsides virales auto-assemblées. Les détails moléculaires régissant l'assemblage peuvent être suivis jusqu'à l'échelle atomique notamment par RMN, cristallographie aux rayons X et cryo-microscopie électronique.

sur un problème commun. Cet apprentissage des autres disciplines ainsi que les rencontres et discussions lors des réunions plénières permettent de créer des liens entre des chercheurs qui ne se croisent pas naturellement pour permettre l'émergence de nouvelles collaborations. La richesse des échanges dépendra principalement de la volonté des scientifiques d'aller vers des domaines qui ne leurs sont pas familiers.

DÉFINIR UN LANGAGE COMMUN ENTRE LES SCIENTIFIQUES DE DIFFÉRENTES DISCIPLINES

Pour que les discussions scientifiques soient constructives, MéDynA souhaite bâtir un langage commun pour que ses membres bénéficient de toutes les compétences pour appréhender le défi principal du domaine : avancer dans la maîtrise de ces mécanismes d'assemblages.

CONTACT

Directeur

Stéphane Bressanelli (I2BC Paris-Saclay)
stephane.bressanelli@i2bc.paris-saclay.fr
<https://medyna.cnrs.fr>

cnrs **GDR** Groupement de recherche
MéDynA Mécanismes et dynamiques de formation des assemblages protéiques auto-organisés

GDR MUFOPAM

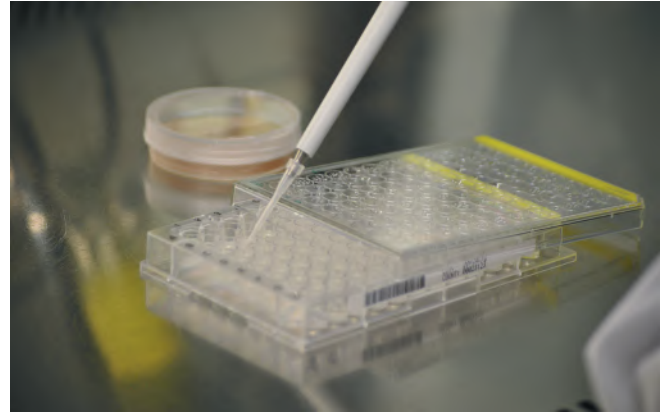
Multifonction des peptides antimicrobiens

OBJECTIFS

Le GDR MuFoPAM sont de :

- fédérer la communauté française œuvrant dans le domaine des peptides antimicrobiens (PAM), de leurs multiples activités biologiques et de leurs applications ;
- favoriser les synergies entre les différentes disciplines afin de permettre l'émergence de projets communs innovants et transversaux ;
- développer et valoriser la multifonctionnalité des PAM, notamment comme une alternative à l'augmentation de la résistance aux antibiotiques ou encore pour des activités biologiques largement sous estimées.

Dans ce contexte *One Health*, cinq axes thématiques sont définis.



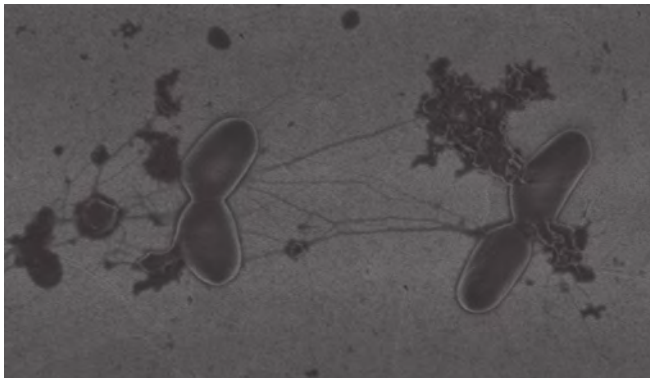
© Philippe Bulet, Institute for Advanced Biosciences/INSERM Grenoble

Test d'activité antimicrobienne

THÉMATIQUES

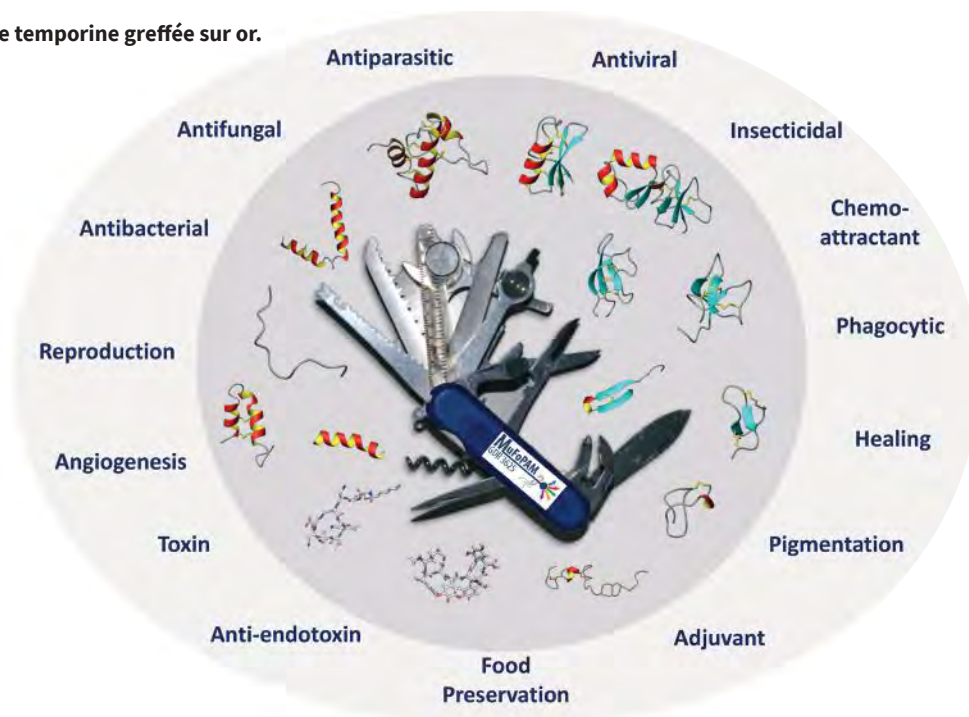
- Diversité d'origines, de structure et d'activité biologique
- Résistance microbienne
- Écologie microbienne
- Vectorisation et fonctionnalisation de surface
- Stratégie de valorisation

© Vincent Humblot, Institut de recherche femto-st



Listeria tuée au contact d'une temporine greffée sur or.

Illustration des diversités structurales et fonctionnelles des PAM.



© courtoisie GDR MuFoPAM

250 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 48 LABORATOIRES

PROSPECTIVES

LE CONTEXTE ACTUEL

La résistance aux antibiotiques constitue aujourd'hui un réel problème de santé public dont les prévisions annoncent plus de 10 millions de morts par an en 2050, soit un nombre de décès supérieur à celui associé au cancer. Face à ces données alarmantes, plusieurs plans d'action pour lutter contre la résistance aux antibiotiques ont été mis en place aussi bien au niveau mondial, européen, que national. Parmi les objectifs figurent la recherche et le développement de nouvelles alternatives aux antibiotiques.

LES PAM : UNE DES ALTERNATIVES LES PLUS PROMETTEUSES AUX ANTIBIOTIQUES

Une des alternatives les plus prometteuses aux antibiotiques, moins propices à l'acquisition rapide de résistance, réside dans l'identification, l'amélioration et/ou le développement de peptides antimicrobiens (PAM). Les PAM sont produits naturellement par tout organisme vivant colonisé ou infecté par un agent pathogène, ou lors d'un processus inflammatoire.

La lutte contre la résistance aux antibiotiques s'intègre dans une approche de Santé Unique *Global One Health* et regroupe des acteurs impliqués en santé humaine, animale et/ou environnementale. L'activité du GDR MuFoPAM s'inscrit pleinement dans cette approche intégrative et multidisciplinaire puisqu'il regroupe des équipes impliquées dans ces trois domaines de recherche.

LES ACTIONS DU GDR MUFOPAM

Les PAM sont une ressource naturelle inépuisable de molécules prometteuses en antibiothérapie. Chaque jour apporte un enrichissement des connaissances sur de nouveaux PAM, ainsi que sur la compréhension de leurs mécanismes d'action. Ces derniers sont beaucoup plus subtils qu'initialement prévus avec des interactions complexes non seulement avec les structures membranaires, mais aussi avec de multiples cibles intracellulaires. Outre cette exploration de la biodiversité (diversités d'origine, de structures, de fonction et de mécanisme d'action), certaines équipes du GDR s'attachent à comprendre les mécanismes développés par les bactéries pour échapper à l'action des antibiotiques.

En effet, la compréhension de l'évolution de la résistance est indispensable pour prévenir son apparition. Dans le contexte *Global One Health*, le GDR s'intéresse également aux microbiotes, et en particulier à la relation complexe microbiotes/hôtes/PAM. Enfin, dans le but ultime de développer les PAM comme thérapeutiques de demain, plusieurs équipes du GDR travaillent sur la vectorisation des PAM et sur la fonctionnalisation de surface aussi bien pour des usages préventifs que curatifs.

LE DÉFI

En 2018, on comptait plus de 50 peptides thérapeutiques sur le marché toute cible confondues. En ce qui concerne les peptides antimicrobiens, on recense en 2019 plus de 70 PAM dans le pipeline des candidats thérapeutiques dans le monde, dont 34 dans les essais précliniques et 27 en clinique.

Le défi qui rassemble tous les membres du GDR, que leurs recherches soient fondamentales ou appliquées, est d'œuvrer pour cette valorisation des PAM comme nouvelles molécules thérapeutiques.

CONTACTS

Directrice

Céline Landon (CBM Orléans)
celine.landon@cnrs-orleans.fr

Directeur adjoint

Philippe Bulet (IAB Grenoble)
philippe.bulet@univ-grenoble-alpes.fr

<http://www.mufopam.cnrs.fr>

GDR O3

Odorant – odeur – olfaction

OBJECTIFS



© Sébastien Fiorucci, ChemoSim/ Univ Côte d'Azur

Mise au point de modèles numériques basés sur des approches de modélisation moléculaire, de machine learning, ou encore de bioinformatique structurale pour déchiffrer le code combinatoire de la perception chimiosensorielle.

La mission du GDR O3 est d'étudier les odeurs et l'olfaction à travers des domaines de recherche différents. Le GDR associe donc des chercheuses/chercheurs en biologie, chimie, physique, informatique, philosophie, sciences humaines et sociales autour de sujets qui passionnent le grand public

Ainsi, les objectifs de ce GDR sont de :

– faire émerger une communauté pour constituer un pôle d'experts ;

- renforcer le rayonnement scientifique, notamment international, autour de l'olfaction ;
- développer la communication et faire émerger des projets interdisciplinaires qui seront propulsés au niveau national (ANR...) puis à l'international (projet Horizon2020) avec des partenaires académiques et avec des industriels (parfums, agro-alimentaire, pharmacologie...);
- organiser des rencontres scientifiques.



© Sandra Perez et Jamel Ben Hassine, Univ. Côte d'Azur

Carte des plaintes des riverains en matière de nuisances olfactives à Chateaufrenard.

THÉMATIQUES

- Physiologie et psycho-physiologie de l'olfaction
- Odorants comme moyens de communication
- Ingrédients odorants & innovation
- Odeurs, cultures et société
- Odeur & goût

>150 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 55 LABORATOIRES

PROSPECTIVES

L'enjeu de ce GDR est de traiter les différentes thématiques de l'olfaction de manière interactionnelle, créant de l'émulation et de la coopération autour de recherches allant de la molécule à la société, du composé odorant à sa détection par les récepteurs olfactifs et sa perception par le cerveau, avec les implications médicales et sociétales dans une thématique santé et bien-être.

L'impact des odeurs et des odorants en sciences humaines et sociales avec des aspects d'anthropologie cognitive, de langage, de psychologie, d'histoire et de géographie seront centraux.

Le GDR sera également impliqué dans les thématiques d'apprentissage des odeurs, de la perception, de l'hédonisme, de nez et de compositions.

Les aspects industriels seront également pris en compte, des matières premières aux produits finis, pour des applications variées, allant de la parfumerie fine aux détergents, de la protection des plantes à l'industrie alimentaire ou la cosmétique. De nombreuses équipes du GDR O3 ont des interactions fortes avec le pôle de compétitivité de la Cosmetic Valley et ces liens étroits avec l'industrie favorisent les demandes aux appels à projets nationaux (ANR-PRCE) ou à l'Europe.

RECHERCHES DU GDR O3 AU CŒUR DE L'ACTUALITÉ SANITAIRE

Il est apparu qu'un symptôme fréquent et précoce de la maladie COVID-19 était une altération de la perception olfactive. Des données ont été collectées dans plusieurs pays impactés par le virus SARS-CoV-2 et commencent à décrire les caractéristiques de ces altérations. Cependant, le recul reste encore limité. Les causes et conséquences de ces troubles de la perception olfactive sur la vie quotidienne des patients restent à ce jour mal connues, mais elles sont actuellement à l'étude. En effet, plusieurs travaux nationaux et internationaux menés par des équipes du GDR O3 et par le GCCR (Global Consortium for Chemosensory Research – <https://gcchemosensr.org>, créé en début de pandémie qui regroupe plus de 600 chercheuses/chercheurs dans plus de 50 pays) auxquels de nombreuses équipes du GDR ont participé, ont déjà été publiés¹ ou sont encore en cours². Ces études ont pour but de mieux comprendre les troubles olfactifs liés à la COVID-19.

Un nouveau site web est en cours de développement pour mieux répondre aux attentes du grand public en termes d'informations, mais également pour mieux fédérer les actions de recherche en cours au GDR, les formations, les appels d'offres...

DIFFUSION DE LA SCIENCE

La formation est un des objectifs principaux du GDR. Il est prévu d'organiser des écoles thématiques autour des différents thèmes développés.

FORMATION

La formation est un des objectifs principaux du GDR. Il est prévu d'organiser des écoles thématiques autour des différents thèmes développés.

1 (Gerkin *et al.* 2020 ; Pierron *et al.* 2020 ; Parma *et al.* 2020 ; Irvana *et al.* 2020...)

2 (<https://form.crn.fr/index.php/146862?newtest=Y&lang=fr>)

CONTACT

Directrice

Nathalie Mandairon (CRNL Lyon)

nathalie.mandairon@cnrs.fr

<https://www.gdr-o3.cnrs.fr>

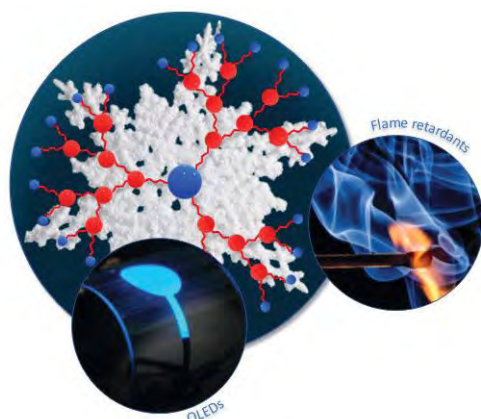
GDR PHOSPHORE

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 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.



De la molécule aux matériaux de fonctions.

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



Catalyse : vers une chimie plus efficace et verte.

© CNRS Photothèque



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

© Franck Lafont, Nicolas Barrois, CMI-CILL/CNRS/Photothèque CNRS

THÉMATIQUES

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

46 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 32 LABORATOIRES

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 au 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-compatibles, 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, et l'étude de leurs propriétés, en privilégiant les designs structuraux inédits et les applications catalytiques en termes de contrôle de la réactivité et de la stéréosélectivité.

MOLÉCULES BIOACTIVES ET APPLICATIONS

Dans le monde du vivant, le phosphore est un élément majeur, puisqu'il sert en particulier de lien structurant, sous forme de phosphate, entre les différentes bases de l'ADN. 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.

CONTACT

Directeur

Marc Lecouvey (CSPBAT Paris)

marc.lecouvey@univ-paris13.fr

<https://gdrphosphore.sciencesconf.org>

GDR PES

Photo-électro stimulation

OBJECTIFS



© courtesy of Jean-François Bergamini

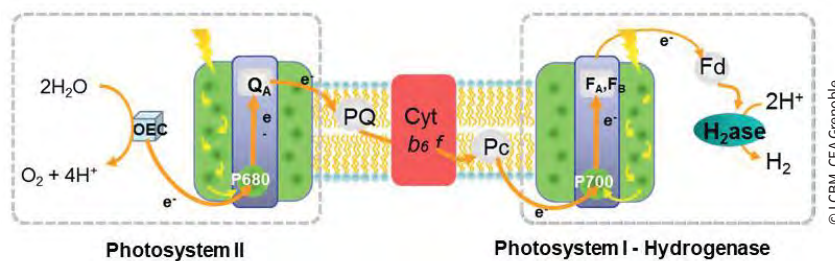
Image illustrant un concept d'électroluminescence photoinduite à des anodes de BiVO_4

Les objectifs du GDR PES sont de :

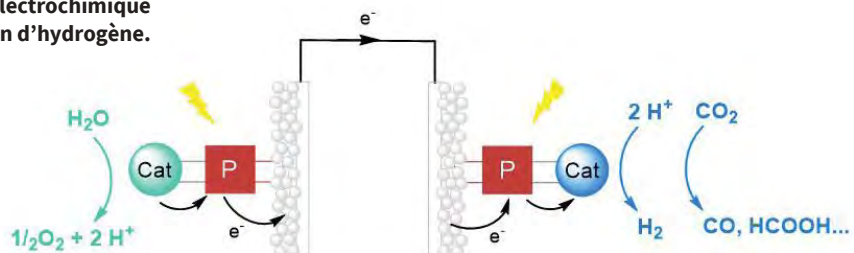
- constituer une communauté autour de la thématique photo-électrostimulation, c'est-à-dire l'ensemble des phénomènes dans lesquels l'action conjointe des électrons et des photons peut induire une modification contrôlée d'un système moléculaire ou d'un (nano) matériau et donc *in fine* de ses propriétés. 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/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.



200 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 49 LABORATOIRES

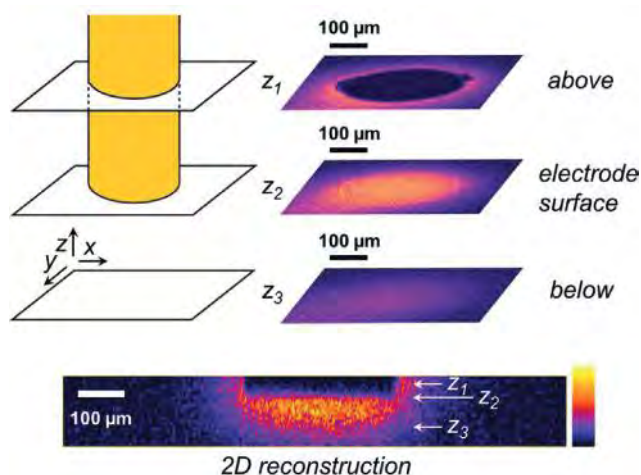
PROSPECTIVES

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 CO₂ 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, via en particulier 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 chercheur-se-s.



© Laurent Bouffier
© 2016 American Chemical Society.

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

Des journées scientifiques inter-GDR permettront également 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/Yvette)
mioman@ens-paris-saclay.fr

Directeur adjoint

Rémi Métivier (PPSM Gif/Yvette)
metivier@ens-paris-saclay.fr

www.gdrpes.cnrs.fr

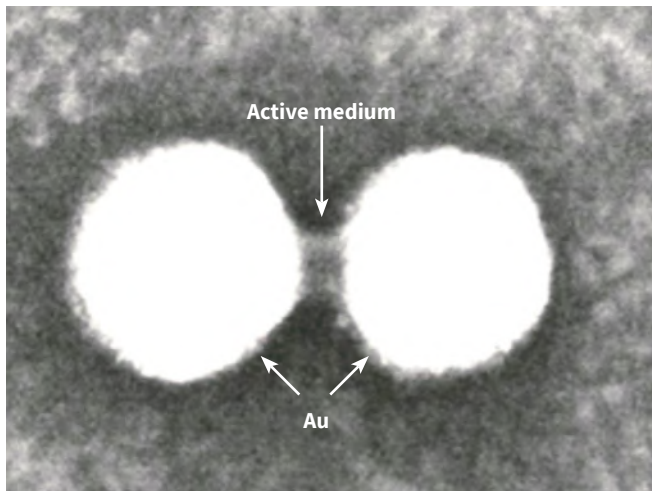
GDR PLASMONIQUE ACTIVE

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.



THÉMATIQUES

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

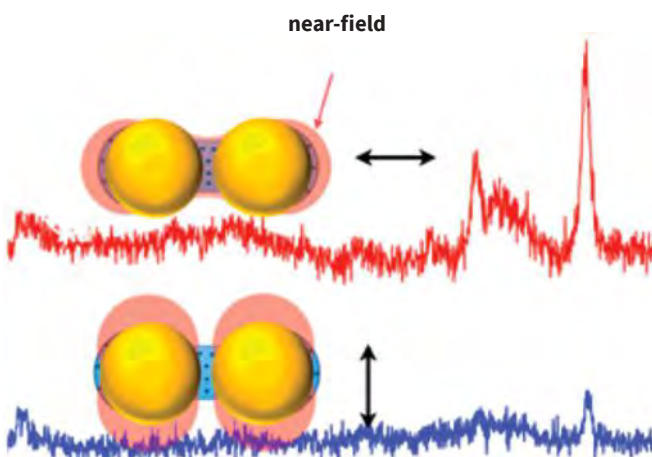
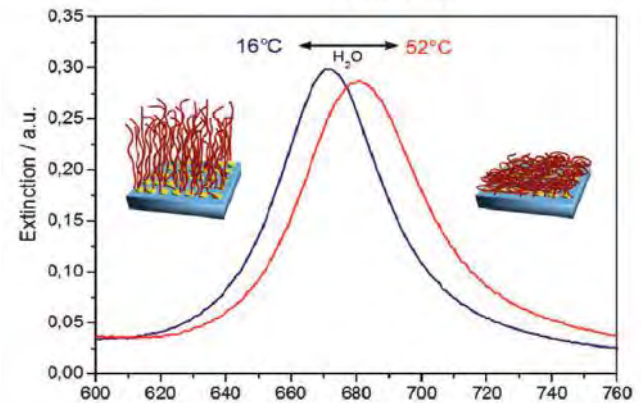
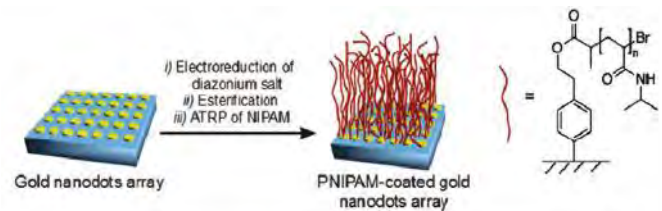


Schéma et image MEB d'un dimère hybride de nanoparticules d'or.



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

150 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 20 LABORATOIRES

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 infrarouge 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 4 axes proposés, le GDR souhaite à franchir des étapes importantes sur la compréhension de phénomènes photo-induits de transferts d'électrons chauds entre systèmes organiques et inorganiques.

CONTACTS

Directeur

Nordin Félidj (ITODYS Paris)
nordin.felidj@u-paris.fr

Directeur adjoint

Marc Lamy de la Chapelle (IMMM Le Mans)
marc.lamydelachapelle@univ-lemans.fr

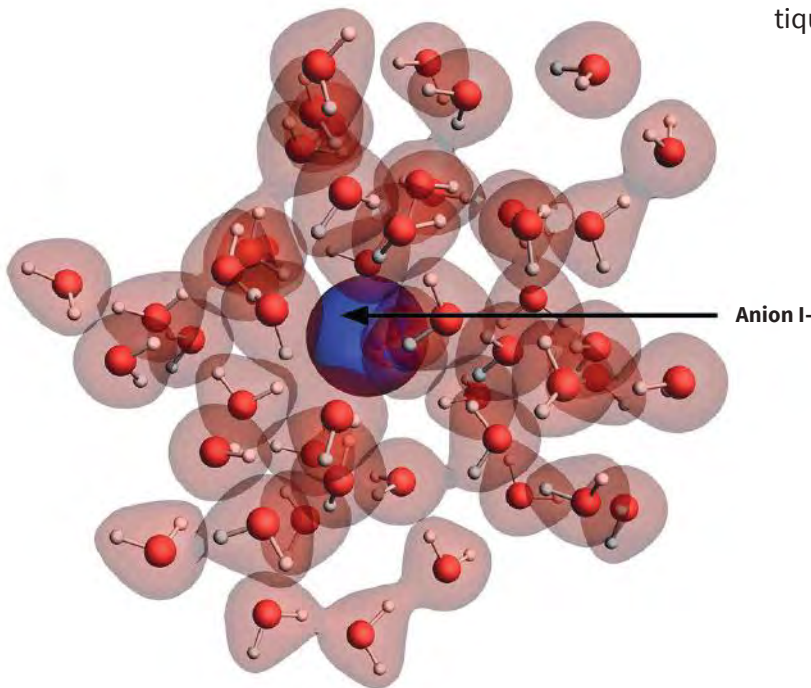
Site internet en construction

GDR NBODY

Problème quantique à N corps en chimie et physique

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.



Calcul quantique du système $I-(H_2O)_{50}$

THÉMATIQUES

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

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

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

100 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 37 LABORATOIRES

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 la combinaison des méthodes de fonction d'onde



© Cyril Frésillon, Photothèque CNRS

Supercalculateur CURIE.

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.

CONTACT

Directeur

Julien Toulouse (LCT Paris)
toulouse@lct.jussieu.fr

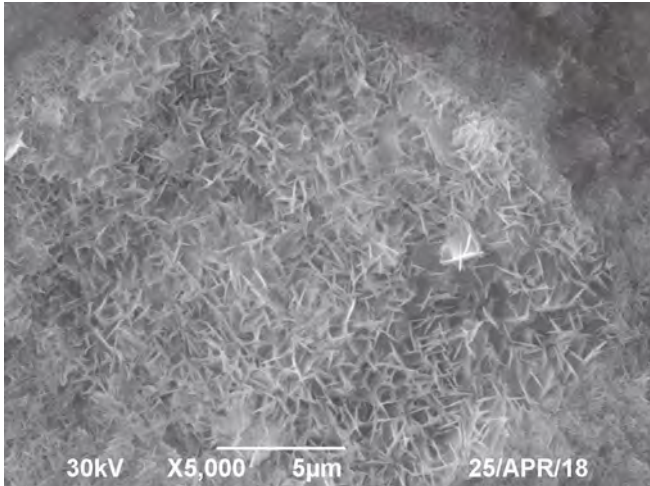
wiki.lct.jussieu.fr/gdrnbody

 **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

OBJECTIFS



© Marie Le Page Mostefaï, LRGPE/ENSIC

Image au microscope électronique à balayage de l' α -Co(OH)₂

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.

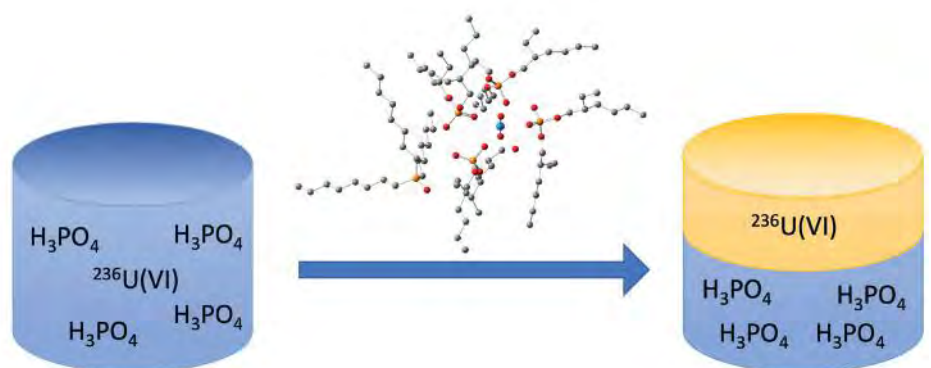
THÉMATIQUES

- 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 Mostefaï, LRGPE/ENSIC

140 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 27 LABORATOIRES

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 physico-chimique 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 ;
- communicant 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

Directrice

Marie Le Page Mostefa (LRGP Nancy)

marie.le-page-mostefa@ensic.univ-lorraine.fr

Directeur adjoint

Laurent Cassayre (LGC Toulouse)

laurent.cassayre@ensiacet.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 RAFALD

Réseau des acteurs français de l'ALD

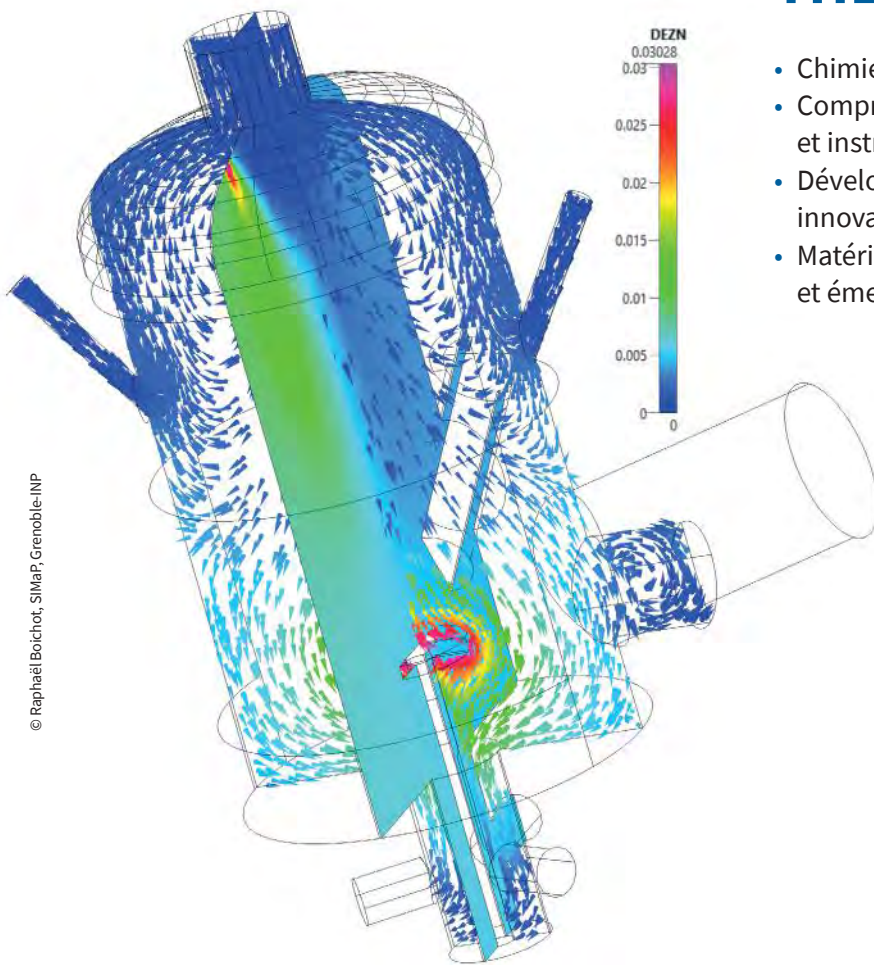
OBJECTIFS

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. 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.

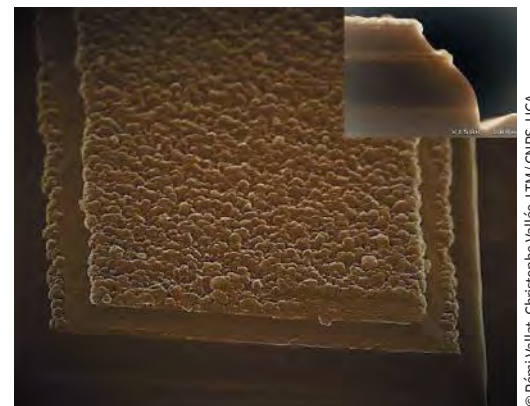
THÉMATIQUES

- 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



© Raphaël Boichot, SIMaP, Grenoble-INP

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



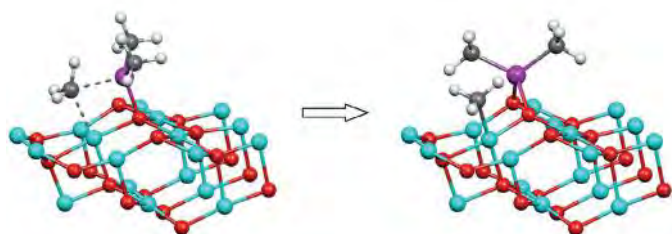
© Rémi Vallat, Christophe Vallée, LTM/ CNRS, UGA, Rémy Gassilloud, CEA-LETI

Dépôt sélectif contrôlé de TiO₂ sur TiN vs SiO₂

120 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 26 LABORATOIRES

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 framework*) représente également un domaine en plein essor.



© Alain Estève, LAAS/CNRS
Décomposition dissociative de TMA (TriMethyl Aluminium) sur une surface de CuO(11-1)

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 ;

- 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

Elisabeth Blanquet (SIMaP Grenoble - INP)
elisabeth.blanquet@simap.grenoble-inp.fr

Directrice adjointe

Nathanaelle Schneider (IPVF Palaiseau)
n.schneider@cnsr.fr

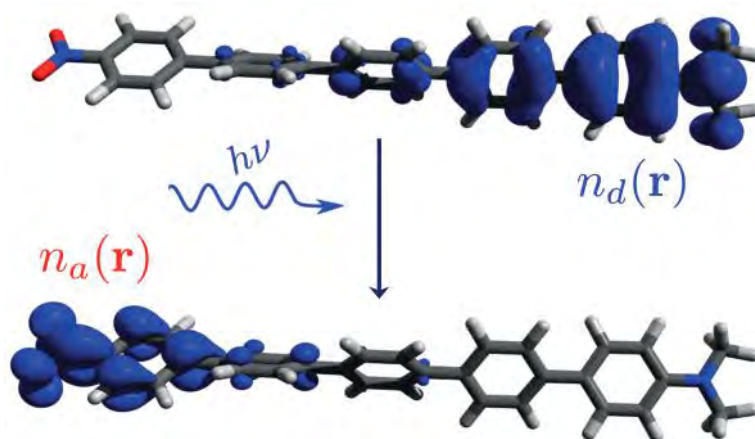
<http://rafald.org>

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

OBJECTIFS

RFCT est un GDR de l'Institut de chimie du CNRS créé en 2010 (renouvelé en 2014 et 2018) qui rassemble en son sein l'ensemble des chimistes théoricien-ne-s 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 théoricien-ne-s dans toutes les sections de l'Institut de chimie du CNRS (INC).

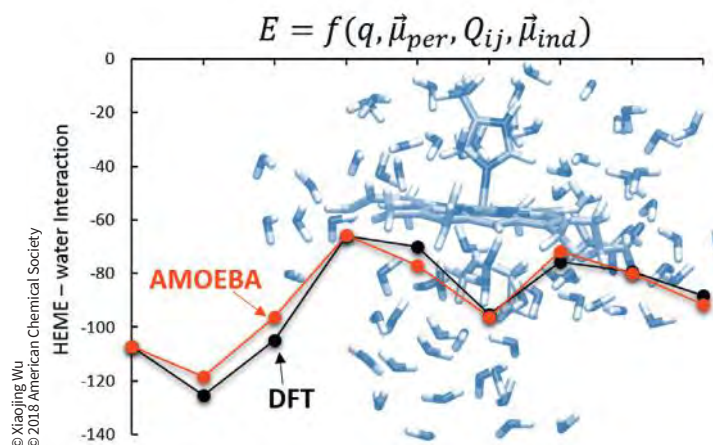


Orbitales moléculaires pour la transition électronique d'un système de type donneur-accepteur.

© Thibaut Etienne, LCCM Montpellier

THÉMATIQUES

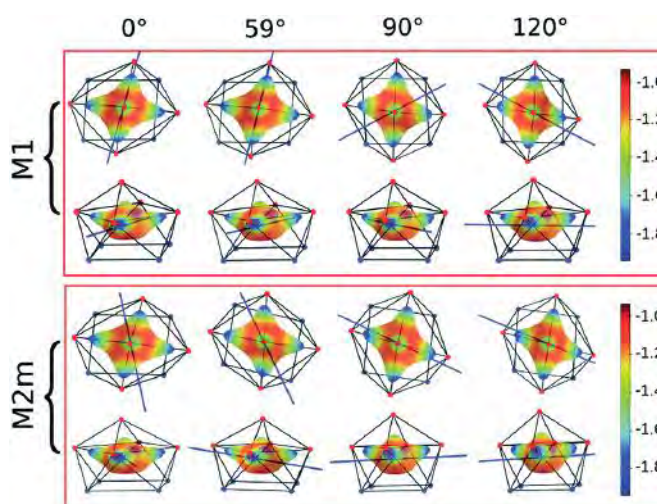
- Animation de la communauté scientifique (soutien aux manifestations scientifiques, rencontres nationales et rencontres prospectives en alternance, prix de thèse Gaston Berthier)
- Formation des jeunes chercheur-se-s (théoricien-ne-s ou expérimentalistes) aux outils de la chimie théorique
- Valorisation 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

© 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



Potentiel électrostatique dans des aimants moléculaires à base de lanthanides.

500 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 50 LABORATOIRES

PROSPECTIVES

En 2022, le GDR RFCT évoluera pour devenir la Fédération de Recherche “Théories, Modélisations et Simulations atomistiques” (ThéMoSiA).

ThéMoSiA est un projet de fédération 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 projet de Fédération 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 bis-annuelle 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 la Fédération 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 exploiter¹.

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” du RFCT) et de formations spécifiques pour les développeurs en lien avec la future logithèque.

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

CONTACTS

Directrice

Sophie Sacquin-Mora (LBT Paris)
sacquin@ibpc.fr

Directrice adjointe

Karine Costuas (ISCR Rennes)
karine.costuas@univ-rennes1.fr

Directeur adjoint

Rémi Maurice (SUBATECH Nantes)
rmaurice@subatech.in2p3.fr

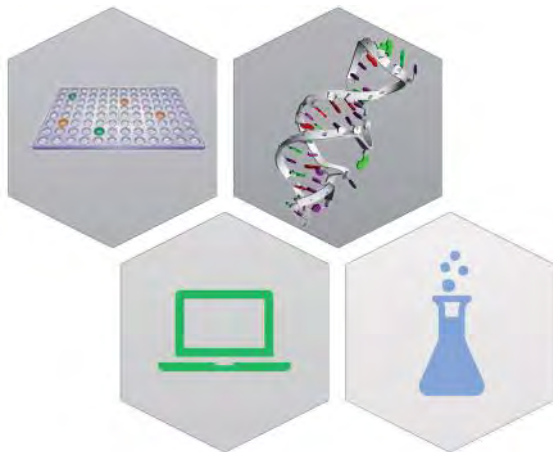
www.chimie-theorique.cnrs.fr

[@RFCTtheo](https://twitter.com/RFCTtheo)

GDR RNA

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

OBJECTIFS



© Maria Duca, ICN/Université Côte d'Azur

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.

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

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

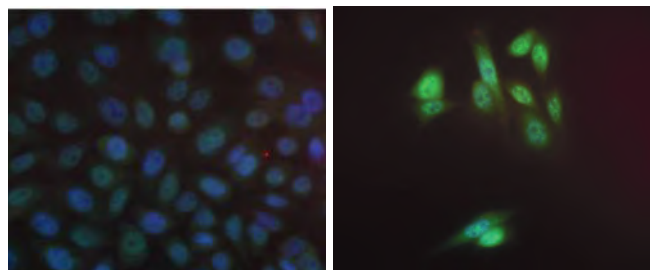


© transféré avec courtoisie par Maria Duca, ICN/Université Côte d'Azur

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*



© Maria Duca, ICN/ Université Côte d'Azur

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.

130 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 25 LABORATOIRES

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 (e.g., G-quadruplexe d'ARN, riboswitch bactérien) ont été identifiés et étudiés. Les deux approches sont donc complémentaires et peuvent converger pour 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.

CONTACT

Directrice

Maria Duca (ICN Nice)

maria.duca@univ-cotedazur.fr

gdr-rna.cnrs.fr

[@RNA_CNRS](https://twitter.com/RNA_CNRS)

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

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.

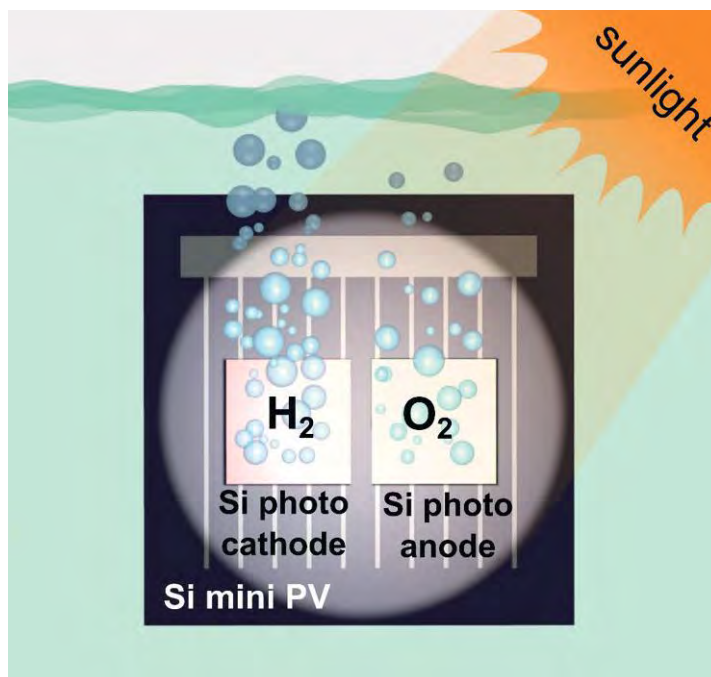
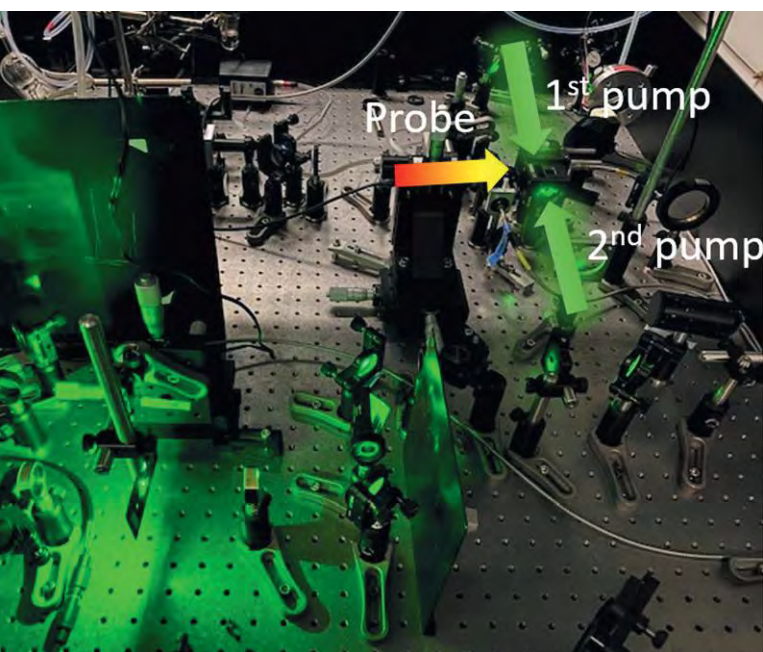


Schéma d'une cellule photoélectrochimique à base de silicium pour la production d'Hydrogène à partir d'énergie solaire et d'eau.



Sonder l'accumulation de charges par spectroscopie pompe-sonde.

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

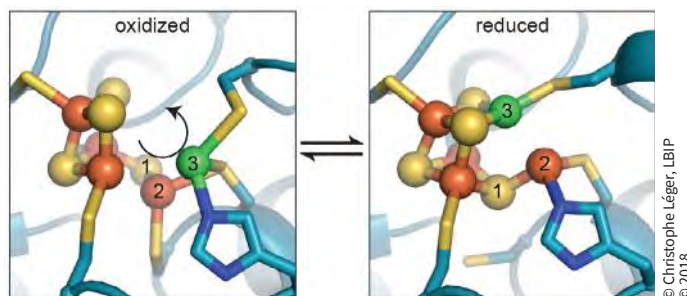
130 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 55 LABORATOIRES

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 de très prometteurs résultats. 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_2 en CO.

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

Directrice adjointe

Murielle Chavarot-Kerlidou (LCBM Grenoble)

murielle.chavarot-kerlidou@cea.fr

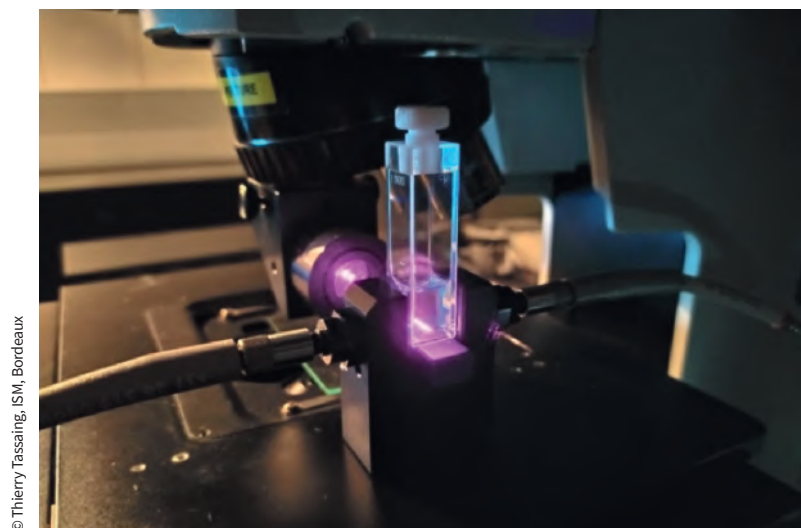
<https://www.solarfuels.cnrs.fr>

GDR SOLVATE

Solvation : avancées théoriques et expérimentales

OBJECTIFS

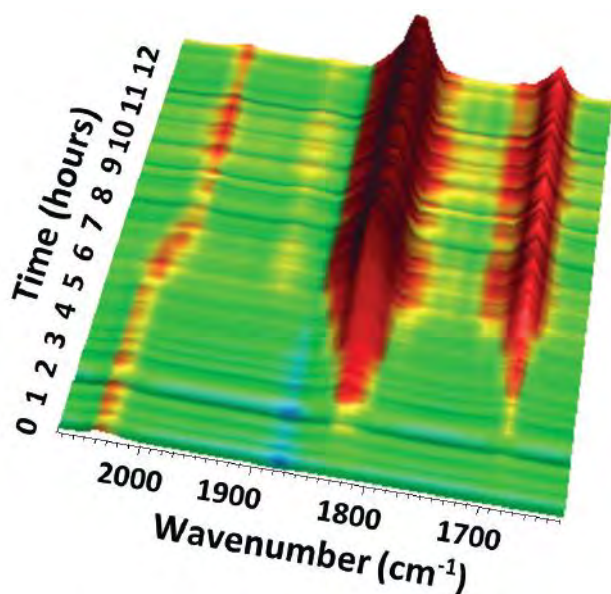
L'importance des effets de solvant a continûment poussé les limites des connaissances, dans la recherche de base comme dans des domaines applicatifs. Une mission essentielle du GDR SolvATE est de faire surgir la problématique générale de la solvation comme un domaine transverse primordial de la chimie 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.



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

© Thierry Tassaing, ISM, Bordeaux

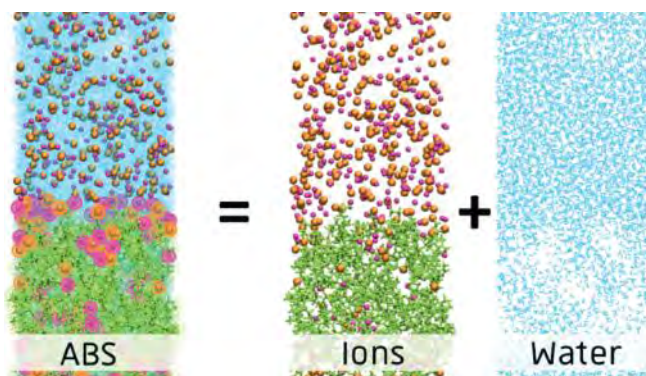
© Thierry Tassaing, ISM, Bordeaux



Étude cinétique (ATR-IR) de la synthèse du carbonate d' α -alkylidène (couplage catalytique du CO_2 avec le 2-méthyl-3-butyn-2-ol).

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



© Rachel Schurhammer, Université de Strasbourg

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

100 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 37 LABORATOIRES

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 procé-

dés, 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, et 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

Directeur adjoint

Abdenacer Idrissi (LASIRE Lille)
Nacer.Idrissi@univ-lille.fr

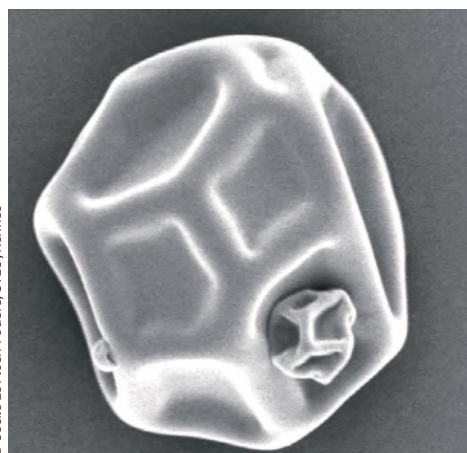
<https://solvate.cnrs.fr>

GDR SLAMM

Solliciter la matière molle

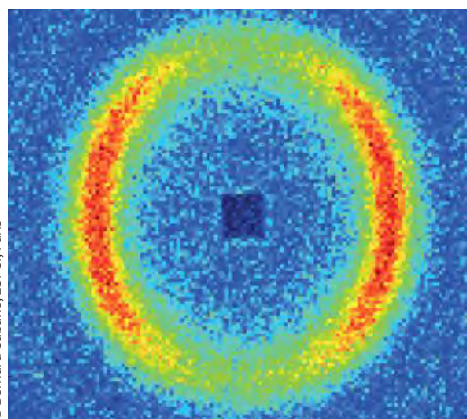
OBJECTIFS

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 : Chimie, Physique et Sciences de l'Ingénierie et des Systèmes. 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.



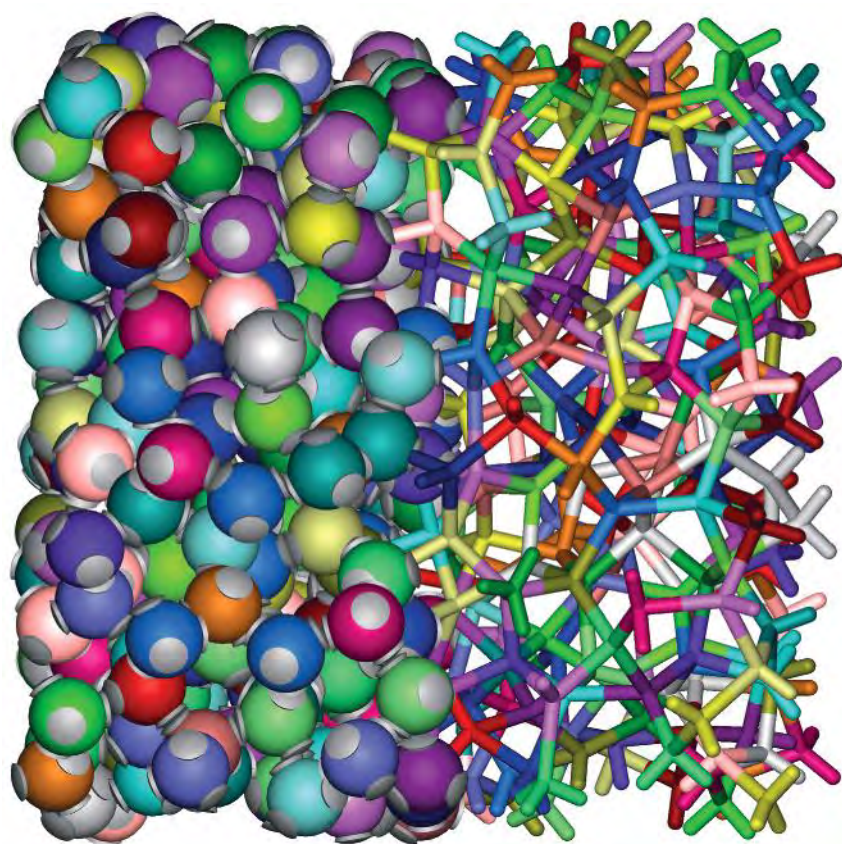
© Cécile Le Floch-Fouéré, STLO, Rennes

Grain de poudre de caséine micellaire.



© Bernard Cabane, ESPCI, Paris

Spectre 2D de diffusion de neutrons aux petits angles.



© Franck Smallegange, LPS Orsay

Fluide de particules à patchs.

THÉMATIQUES

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

300 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 40 LABORATOIRES

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 méthodologiques¹, que sur l'accès aux grands instruments de mesures et leur apport² ;

- 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*).

1 *Les méthodes de mesure pour un échantillon hétérogène : échantillonnage et représentativité*

2 *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

Directeurs adjoints

Antoine Bouchoux (INRA TBI Toulouse)
antoine.bouchoux@insa-toulouse.fr

Ludovic Pauchard (FAST Orsay)
pauchard@fast.u-psud.fr

<https://slamm.cnrs.fr>

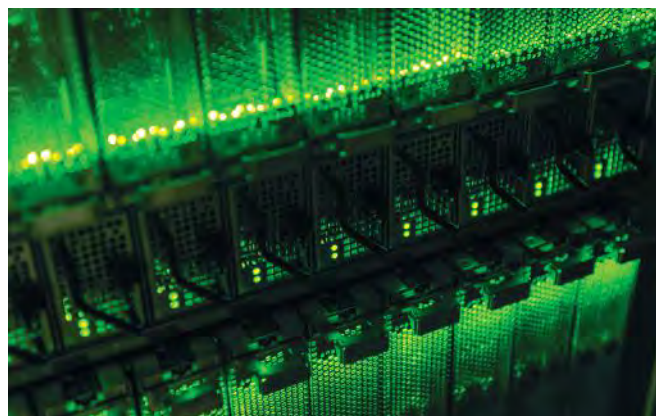
GDR SNMS2

Substances naturelles : méthodes et stratégies de synthèse Les défis de demain

OBJECTIFS

Les objectifs du GDR SNMS2 seront d'encourager les échanges entre plusieurs communautés de scientifiques qui s'intéressent à la synthèse organique multi-étape, la chimie théorique et l'informatique. Seront abordées des questions concernant la gestion des données, un point crucial en lien avec le cahier de laboratoire, et la prédiction expérimentale. Par la mise en place de

rencontres scientifiques interdisciplinaires et d'actions de formation, nous chercherons à développer des compétences et à encourager l'émergence de thématiques connexes. Enfin, nous chercherons à faciliter le transfert des connaissances scientifiques et techniques entre les équipes, vers l'industrie, et vers le grand public.



© Cyril Fréssillon, CNRS Photothèque

Nœuds de calcul du supercalculateur Jean Zay capable d'effectuer $13.9 \cdot 10^{12}$ opérations par seconde.

THÉMATIQUES

- Stratégies vers une synthèse idéale
- Synthèse totale & *machine learning*



© Laurence Médard, CNRS Photothèque

Cahier de laboratoire propre à chaque chercheur.



© Cyril Fréssillon, CNRS Photothèque

Montage de laboratoire pour réaliser une synthèse organique.

190 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 26 LABORATOIRES

PROSPECTIVES

Dans le cadre de la synthèse totale, et de la synthèse organique plus largement, le *machine learning* peut être utilisé pour réaliser différentes tâches.

DÉCONNEXIONS RÉTROSYNTHÉTIQUES

Un programme peut proposer des rétrosynthèses pour une molécule donnée. Pour entraîner un tel programme, il est nécessaire de disposer un grand corpus de réactions. Historiquement, ces approches ont commencé dans les années 1960 avec le programme LHASA de Corey, basé cependant sur une pure logique rétrosynthétique. D'autres programmes permettent d'apporter une aide à la déconnexion, en identifiant les cycles les plus pontés qui, selon Corey, doivent être déconnectés en premier. Aujourd'hui, le *machine learning* devrait être capable d'améliorer ses capacités de résolution de problèmes de plus en plus complexes

PRÉDICTION DE LA FAISABILITÉ DE RÉACTIONS

Un programme peut prédire la faisabilité d'une réaction donnée, et ses produits principaux. Un tel outil nécessite également de disposer d'un grand corpus de réactions pour l'entraîner. Il pourrait être couplé à des données issues de modélisation moléculaire et de chimie théorique.

RECHERCHE EXPÉRIMENTALE AUTOMATISÉE DE CONDITIONS RÉACTIONNELLES

Pour une étape de synthèse donnée, l'identification de conditions réactionnelles permettant d'atteindre une sélectivité ou un rendement suffisant peut demander un grand nombre d'expériences. Une exploration automatisée de conditions réactionnelles (solvants, catalyseurs, additifs, variables de procédés) peut permettre aux chercheurs de gagner beaucoup de temps et de focaliser leurs efforts sur d'autres tâches à plus haute valeur ajoutée comme la rétrosynthèse. Cette exploration des conditions réactionnelles peut être pilotée par un programme de *machine learning*. Un tel programme nécessite beaucoup moins de données que

les deux précédents, car il apprend au fur et à mesure que l'on réalise les essais expérimentaux en utilisant un automate de synthèse, ou de réaliser des réactions en parallèle, pour accélérer la génération de données et donc le processus d'optimisation.

L'accès à des données est indispensable pour pouvoir entraîner des programmes de *machine learning*.

LE CAHIER DE LABORATOIRE

C'est une source très importante de données de réactions "réussies" et "ratées", ce qui est un point très positif pour que les algorithmes de *machine learning* puissent apprendre efficacement, contrairement aux bases de données et articles, qui contiennent en grande majorité des réactions "réussies". Enfin, outre ces données expérimentales, des données issues de la chimie théorique, telles que des barrières d'activation calculées, pourraient aussi être utilisées, notamment pour prédire la faisabilité de réactions.

CONTACTS

Directeur

Cyril Bressy (ISM2 Marseille)
cyril.bressy@univ-amu.fr

Directeur adjoint

Michaël De Paolis (COBRA Rouen)
michael.depaolis@univ-rouen.fr

Site internet en construction

  **Groupement de recherche**
SNMS2 Substances naturelles : méthodes et stratégies de synthèse – Les défis de demain

GDR SYNTH FLUX

Synthèse organique, inorganique et macromoléculaire en flux continu

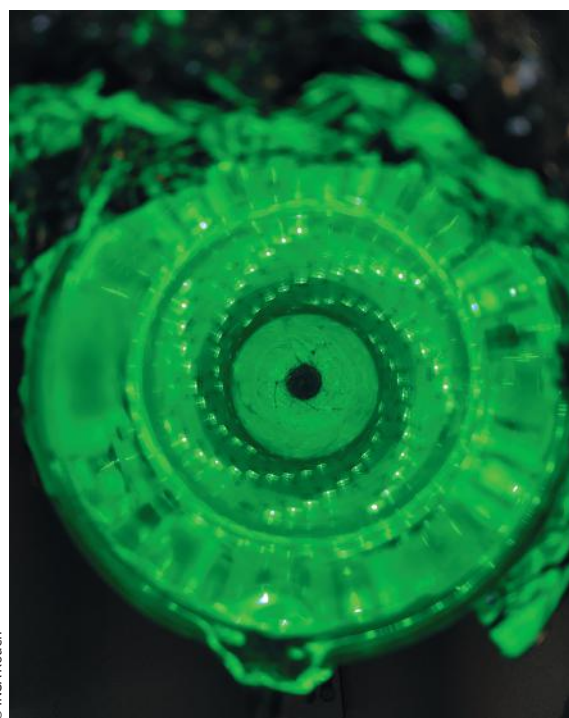
OBJECTIFS



© INSA Rouen

Dispositif de synthèse en flux continu.

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.



© INSA Rouen

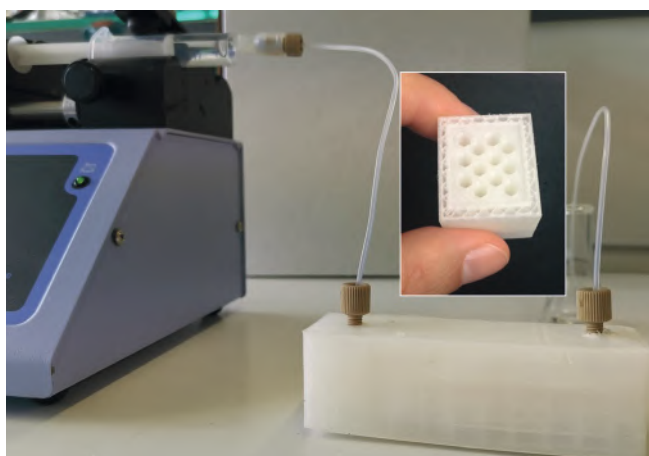
Réacteur tubulaire photochimique.

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.

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)



© INSA Rouen

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

150 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 28 LABORATOIRES

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.

CONTACTS

Directeur

Julien Legros (COBRA Rouen)
julien.legros@univ-rouen.fr

Directeur adjoint

Maël Penhoat (MSAP Lille)
mael.penhoat@univ-lille.fr

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



GDR Groupement
de recherche

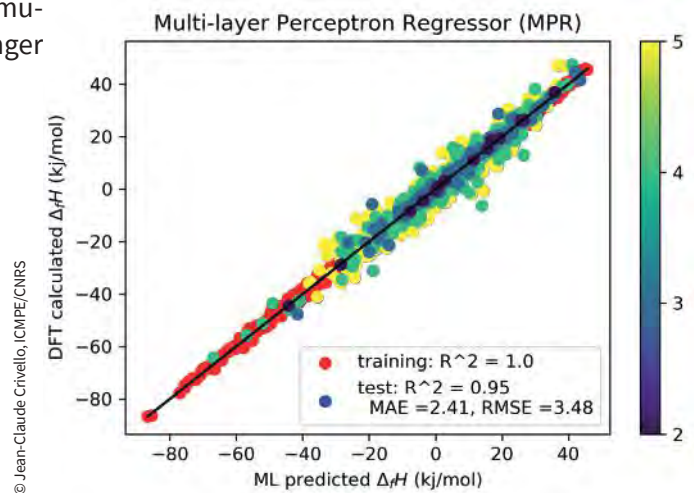
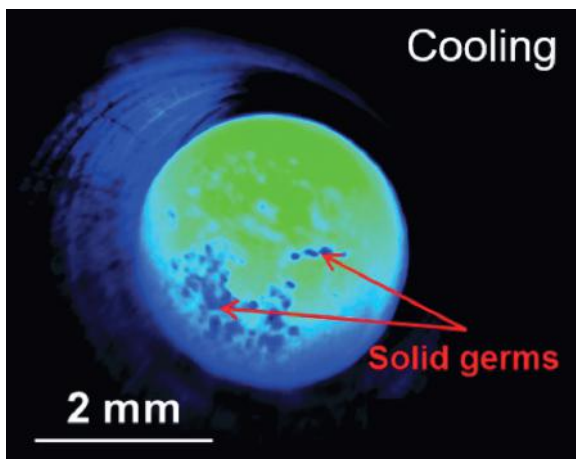
Synth Flux Synthèse organique,
inorganique et macromoléculaire
en flux continu

GDR THERMATHT

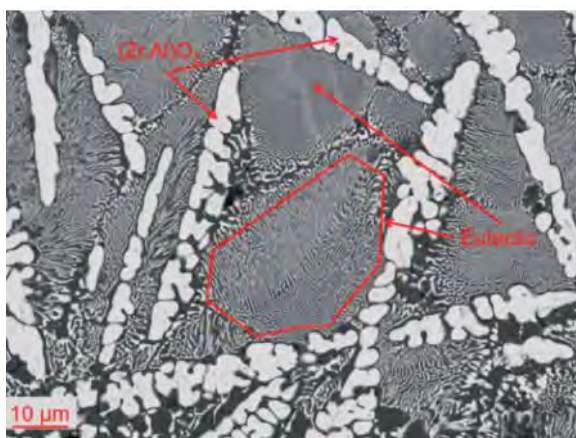
Thermodynamique des matériaux à haute température

OBJECTIFS

Le GDR THERMATHT a été initialement créé dans l'objectif de rassembler, fédérer et structurer la communauté française active dans le domaine de l'acquisition de données thermodynamiques. Le GDR a finalement fédéré bien au-delà. Il rassemble aujourd'hui sur un spectre plus large, dépassant l'acquisition de données expérimentales, s'ouvrant aux calculs *ab initio*, à la modélisation Calphad, plus largement à la modélisation des matériaux et de leurs procédés de synthèse et transformation. Le GDR a aussi pour objectif de promouvoir la discipline thermodynamique via l'organisation de trois écoles thématiques et de formations courtes, via des actions d'ouverture vers d'autres communautés en France (métallurgie, GDR Verre...) et à l'étranger (DFG, APDIC, ThermoCon aux USA).



Couplage calculs DFT et apprentissage automatique (machine learning) pour prédire une enthalpie de formation.



Goutte Al_2O_3 - ZrO_2 liquide en lévitation et microstructure obtenue. Installation ATTILHA au CEA-Saclay.

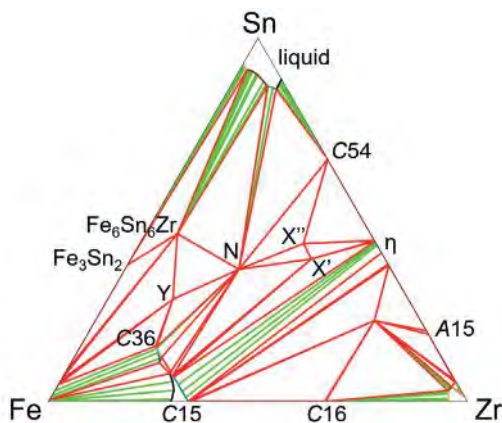
THÉMATIQUES

- Thermodynamique des verres
- Analyse à très hautes températures
- Calculs
- Métallurgie
- Carbure de silicium

160 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 40 LABORATOIRES

PROSPECTIVES

On constate depuis plusieurs années l'émergence des techniques numériques en science des matériaux, avec la modélisation de plus en plus quantitative à toutes les échelles, le design d'alliages, mais aussi l'avènement de l'intelligence artificielle sur lesquels le calcul peut s'appuyer.



Coupe isotherme du système Fe-Sn-Zr @ 900°C

L'acquisition de données thermodynamiques, par le biais de l'expérience ou du calcul *ab initio*, restera donc un sujet important pour les décennies à venir. Il reste beaucoup à faire, notamment sur les matériaux réfractaires et ultra-réfractaires pour lesquels les mesures sont difficiles, mais essentielles à bien des égards. On pourrait citer comme exemple les aluminates de calcium qui sont des composés clés en science de la Terre et planétologie ainsi que pour des applications industrielles telles que les ciments alumineux et Portland. Leurs propriétés thermodynamiques à très haute température ($T > 2000\text{K}$) sont mal connues et des incertitudes dépassant 40 % sont fréquemment observées. La question de la prise en compte des éléments mineurs ou traces dans les alliages métalliques, jusqu'à présent largement négligée, prend de l'importance dans l'objectif de toujours mieux maîtriser et optimiser les propriétés.

Historiquement, la méthode Calphad s'est développée sur la base de modèles énergétiques simples, paramétriques, présentant un intérêt pratique, mais peu représentatif de la physique. La tendance actuelle est au développement des bases thermodynamiques dites de troisième génération dont les modèles énergétiques sont plus solidement ancrés à la physique. Il s'agit par exemple que les capacités calorifiques soient compatibles avec le modèle d'Einstein ou encore de déterminer un modèle permettant une description adéquate et continue des solides vitreux, entre le liquide et le cristal.

Le périmètre du GDR THERMATHT a été celui des propriétés thermodynamiques volumiques des phases. Les interactions avec d'autres communautés ont mis en évidence un manque et donc un besoin d'apporter un effort sur d'autres grandeurs thermodynamiques comme les grandeurs interfaciales ou encore celles associées à la diffusion. Là encore, la modélisation des procédés nécessite l'utilisation de ces grandeurs et donc un effort en termes de mesures, de compréhension et de modélisation.

CONTACT

Directeur

Olivier Dezellus (LMI Lyon)

olivier.dezellus@univ-lyon1.fr

<http://www.thermatht.fr>



Groupement
de recherche
THERMATHT Thermodynamique
des matériaux à haute température

GDR THERMO

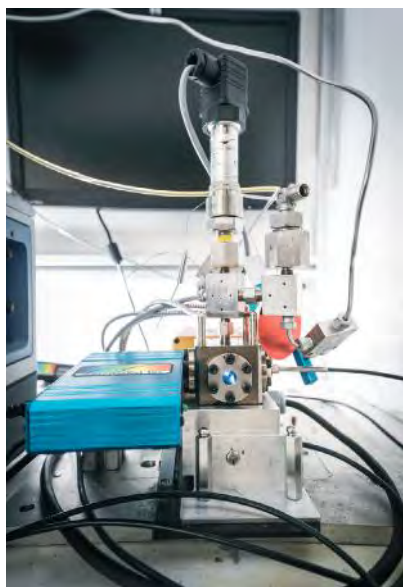
Thermodynamique moléculaire et des procédés

OBJECTIFS

Les objectifs du GDR THERMO sont :

- structurer les communautés de thermodynamique moléculaire, en génie des procédés, énergétique et thermodynamique hors équilibre, en collaboration avec les sociétés savantes existantes ;
- maintenir, partager et développer des compétences en expérimentation et modélisation ;

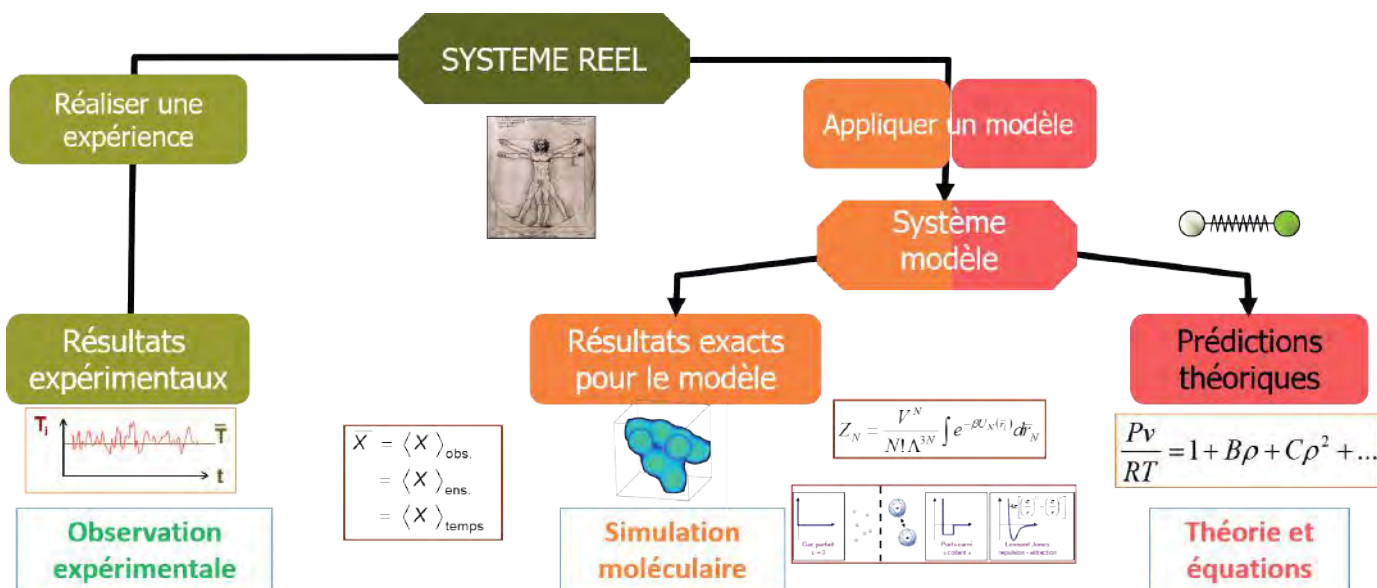
- promouvoir des sujets de recherche interdisciplinaires avec une composante importante de thermodynamique ;
- organiser des plateformes instrumentales et d'outils de modélisation, pour optimiser les méthodes existantes et développer de nouvelles techniques en profitant de complémentarités d'expertises ;
- former étudiants et professionnels à la thermodynamique ;
- pérenniser un club d'industriels en offrant une vision des compétences et des savoir-faire académiques et en initiant des collaborations.



Mesure de viscosité.

THÉMATIQUES

- Thermodynamique moléculaire
- Propriétés thermodynamiques
- Thermodynamique à l'équilibre
- Énergétique
- Thermodynamique hors équilibre

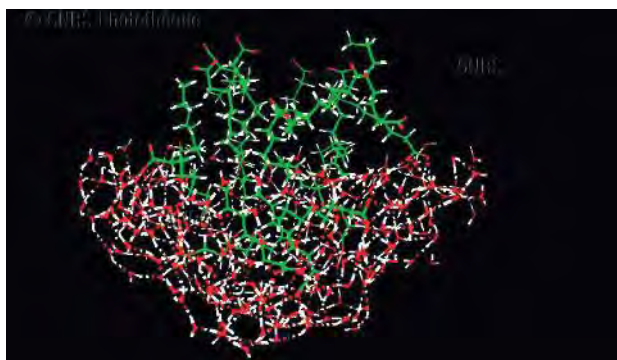


La thermodynamique utilise approches théoriques, simulation et expérimentation.

80 CHERCHEUSES ET CHERCHEURS IMPLIQUÉS AU SEIN DE 24 LABORATOIRES

PROSPECTIVES

Depuis 2012, le GDR THERMO veut être une passerelle structurante entre les communautés de thermodynamiciens disséminées dans plusieurs disciplines, telles que la chimie, le génie des procédés, l'énergétique ou la physique qui se réunissent déjà au sein d'associations et de sociétés savantes, telles que la SCF, la SFGP ou la SFT. Avec elles, il organise des rencontres scientifiques croisées, qui sont doublées d'actions de formation et de soutien à destination des étudiants, des membres académiques et professionnels, sur des concepts théoriques ou des outils et techniques de caractérisation et de modélisation.



© Ruslan Kevorkyants, Annick Goussot, CNRS/Photothèque

Simulation moléculaire d'un mélange liquide.

Les activités de recherche du GDR concernent l'obtention de données physico-chimiques par des mesures expérimentales ou des simulations moléculaires, ainsi que le développement de modèles thermodynamiques pour caractériser des systèmes matériels sous différents états physiques (solide, liquide, gaz, supercritique) qui sont des corps purs ou des mélanges. Les démarches multi-échelles sont favorisées pour définir des outils prédictifs. À cela sont adjoints aussi des développements théoriques autour des 1^{er} et 2nd principes de la thermodynamique autour de concepts transversaux tels que la thermodynamique statistique, l'exergie, la production d'entropie, la thermodynamique en temps fini, la thermodynamique hors équilibre ou la thermodynamique en variables non extensives.

Les domaines de recherche sont variés :

- dans le cadre d'industries de spécialité en grand volume, ils concernent l'étude de nouvelles familles

de composés (liquides ioniques, solvants eutectiques profonds), le développement de fluides technologiques de substitution dans le cadre de la procédure REACH (solvants, absorbants, réfrigérants, caloporteurs, hydrauliques ou lubrifiants), électrolytes dans des dispositifs électrochimiques (piles à combustible, batteries, supercapacités), dissolvants ou compatibilisants (pour plastifier des matériaux polymères, dissoudre la cellulose), pour fabriquer des membranes liquides supportées ou des gels en général ;

- dans le cadre d'activités industrielles en devenir, ils concernent l'étude de systèmes complexes, hétérogènes et nanostructurés : caractérisation et compréhension des phénomènes, procédé d'obtention, analyse de la stabilité, stratégies de modélisation multi-échelles ;
- dans le cadre de la transition énergétique, ils concernent l'étude de systèmes intégrés à grandes échelles : évolution dynamique et trajectoire de système, analyse énergétique de procédé ou de filière de production, travail utile, dissipation d'énergie.

Les perspectives du GDR relèvent d'une poursuite de ses missions et d'une ouverture vers les thermodynamiciens œuvrant dans d'autres domaines ; par exemple en lien les systèmes biologiques, de la cellule au métabolisme d'un organisme entier ou en lien avec les systèmes économiques et sociaux.

CONTACT

Directeur

Vincent Gerbaud (LGC Toulouse)

vincent.gerbaud@ensiacet.fr

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

INDEX

Répartition par sections principales pilotées par l'INC

SECTION 11	Biomimétisme et bioinspiration (BIOMIM)	16
	Liquides ioniques et polymères (LIPS)	30
	Solliciter la matière molle (SLAMM)	62
SECTION 12	Chiralité et multifonctionnalité (CHIRAFUN)	20
	Odorant – odeur – olfaction (O3)	40
	Phosphore	42
	Substances naturelles : méthodes et stratégies de synthèse	
	Les défis de demain (SNMS2)	64
	Synthèse organique, inorganique et macromoléculaire en flux continu (SYNTH FLUX)	66
SECTION 13	Batteries redox flow (REDOXFLOW)	8
	Cavitation	18
	Hydrates de gaz (HYDRATES)	28
	Photo-électro stimulation (PES)	44
	Plasmonique active	46
	Problème quantique à N corps en chimie et physique (NBODY)	48
	Réseau français de chimie théorique (RFCT)	54
	Solvatation : avancées théoriques et expérimentales (SOLVATE)	60

**SECTION
14**

Bioingénierie des interfaces (B2i)	14
Conversion thermochimique de la biomasse et des déchets (THERMOBIO)	24
Macrocycles pyrroliques (MAPYRO)	32
Magnétisme et commutation moléculaires 2 (MCM2)	34
SFN – France Solar Fuels Network – France (SFN FRANCE)	58
Thermodynamique moléculaire et des procédés (THERMO)	70

**SECTION
15**

Alliages métalliques par/pour la fabrication additive (ALMA)	6
Composites à matrice céramique : conception, modélisation, caractérisation (CMC) ²	22
Couplage mécanique oxydation diffusion (CONCORD)	26
Procédés hydrométallurgiques pour la gestion intégrée des ressources primaires et secondaires (PROMÉTHÉE)	50
Réseau des acteurs français de l'ALD (RAFALD)	52
Thermodynamique des matériaux à haute température (THERMATHT)	68

**SECTION
16**

Agents d'imagerie moléculaire (AIM)	4
Big data en chimie (BIGDATACHIM)	10
Bioactifs et cosmétique (COSM'ACTIFS)	12
Mécanismes et dynamiques de formation des assemblages protéiques auto-organisés pathologiques, thérapeutiques, bio-inspirés (MÉDYNA)	36
Multifonction des peptides antimicrobiens (MUFOPAM)	38
L'ARN en tant qu'outil et cible pour la chimie médicinale et la chémobiologie (RNA)	56

CNRS – INSTITUT DE CHIMIE

3, rue Michel-Ange – 75794 Paris Cedex 16
inc.cnrs.fr

Édition 2020

Réalisation et mise en page : Syntexte
Impression : SPRINT (mai 2021)

Photo de couverture : Oligomère électro-luminescent : morphologie en film mince – © Thierry Annette / CNRS Photothèque.

