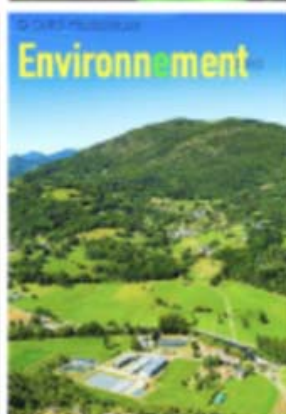


1^{ère} école d'été

du 28 juin
au 2 juillet
2021

université
PARIS-SACLAY

en Chimie
Physique



Organisateurs:
F. Gatti et D. Peláez Ruiz



Sponsors



Programme
Lundi 28/06/2021

Méthodes biophysiques pour la santé et l'environnement

*Spectroscopies et modélisation pour caractériser et optimiser des
protéines fluorescentes pour sonder le vivant*

Intervenants : Institut de Chimie Physique (ICP): Hélène Pasquier, Marie Erard, Fabien Caillez ; Institut de Chimie des Sciences naturelles (ICSN): Ewen Lescop.

Enjeu sociétal : les applications de la fluorescence se rencontrent tous les jours dans notre quotidien : des lessives aux gilets jaunes en passant par les billets de banque. Cette spectroscopie optique est également un outil d'analyse très sensible permettant le dosage de divers polluants de l'environnement ou encore de substances biologiques à caractère clinique. C'est également une technique de choix pour comprendre à l'échelle moléculaire les différents rouages de la machinerie cellulaire. Couplée à l'imagerie, de nombreuses méthodes non invasives à visée de diagnostic ou de thérapies sont développées dont la détection de tumeurs dans les organismes. Les protéines fluorescentes, sondes fluorescentes codées génétiquement et biocompatibles, ont révolutionné le monde des sciences biomédicales. Aujourd'hui il est crucial d'élaborer des protéines fluorescentes robustes et performantes impliquant la mise en œuvre d'approches diverses, comme la RMN, les simulations de dynamiques moléculaires, la fluorescence, etc pour comprendre finement la relation entre leur structure, leur dynamique et leur fluorescence. Plus généralement, ces approches spectroscopiques et théoriques permettent de sonder la structure des molécules biologiques à l'échelle de l'atome avec des applications directes en développement de médicaments et en biotechnologie.

Organisation : Le matin au bâtiment 490 (ICP), l'après-midi à l'ICP ou à l'ICSN

9h00-10h45 (cours) : Introduction aux principes de la fluorescence et de la RMN et leurs applications dans les sciences de la vie et l'environnement.

11h00-13h00 (TP informatique) : Présentation des protéines fluorescentes d'un point de vue applications et modes de fonctionnement, avec un focus sur les aspects structuraux et dynamiques par modélisation moléculaire (devant ordinateur pour visualiser les structures et trajectoires de dynamiques moléculaires).

14h30h-17h00 (TPs) : Deux groupes (TP1/TP2) seront formés, chacun ne faisant qu'un seul des deux TP. Dans la séance de restitution (17h00), chaque groupe expliquera à l'autre groupe leurs observations et conclusion, le bilan de leurs observations sur la relation structure-dynamique-photophysique et montrer l'apport de ces deux techniques spectroscopiques.

- **TP1 :** caractérisation structurale d'une protéine fluorescente cyan et/ou du chromophore synthétique en fonction du pH et de la température par RMN sur les appareils RMN de l'ICSN à Gif-sur-Yvette.

- **TP2 :** caractérisation des propriétés photo-physiques (aspects spectraux et résolus en temps) et dynamiques de la protéine fluorescente par fluorescence.

17h00 : séance de restitution

Programme
Mardi 29/06/2021

Vers les technologies quantiques en chimie

Dynamique quantique moléculaire

Intervenants : Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay (ISMO): Daniel Peláez Ruiz, Fabien Gatti, Raluca Cireasa, CEA (à l'Orme des merisiers) Laboratoire Interactions, Dynamiques et Lasers (LIDYL): Pascal Salières et Lionel Poisson

Enjeu sociétal : La chimie a transformé complètement le monde dans lequel nous vivons. Cependant, les progrès considérables qu'elle a permis s'accompagnent d'une consommation considérable d'énergie et de la production de produits indésirables qui polluent l'environnement. Pour résoudre ces problèmes sociétaux de première importance, il devient vital d'imaginer une chimie travaillant à un niveau plus précis et moins consommatrice en énergie. Il s'agira de sensibiliser les étudiants à l'importance et aux avantages de l'utilisation systématique des propriétés quantiques pour créer une chimie beaucoup plus efficace travaillant au niveau le plus élémentaire des processus moléculaires. Cette nouvelle chimie est directement liée aux développements d'outils expérimentaux de pointe: lasers ultrarapides permettant de suivre et guider les processus chimiques en temps réel (mouvement des noyaux et maintenant des électrons) et spectroscopie moléculaire de très haute résolution. La nature utilise déjà ces phénomènes quantiques pour optimiser des processus biologiques fondamentaux (processus de vision ou de photosynthèse par exemple).

Organisation : le matin à l'Orme des merisiers, l'après-midi dans une salle de TPs informatiques (Idris par exemple).

9h00-10h45 (cours) : Importance des phénomènes quantiques en chimie et de leur possible utilisation à des fins applicatives. Présentation des sources lasers ultrarapides (atto, femto/picosecondes) permettant de contrôler tous les mouvements à l'intérieur des systèmes moléculaires (électrons, noyaux, rotations).

11h15-12h00 : visite d'Attolab à l'Orme des merisiers.

13h30-16h30 : Des simulations sur ordinateur seront proposées permettant de visualiser l'évolution quantique de processus chimiques et la possibilité de développer des technologies quantiques en chimie. Deux TPs sont proposés : collisions impliquant un effet tunnel et accélération et destruction de l'effet tunnel par champ laser, transfert non-diabatique entre états électroniques en photochimie. Deux groupes seront formés, chacun ne faisant qu'un seul des deux TP. Les étudiants travailleront par binômes.

Dans la séance de restitution (17h00), chaque groupe expliquera aux autres groupes leurs observations et conclusions.

Programme

Mercredi 30/06/2021

Bioénergie

Conversion de l'énergie solaire : photosynthèse naturelle et artificielle

Intervenants : CEA, Laboratoire Bioénergétique Membranaire et Stress (BMS): Manuel Llansola Portoles, Andy Pascal, Bruno Robert; LSCE : François Marie Bréon.

Enjeu sociétal : La conversion de l'énergie solaire en énergie chimique par la photosynthèse des plantes et des algues se produit en une vingtaine de picosecondes et implique de nombreux transferts d'énergie d'excitation et d'électrons. Au cours des vingt dernières années, notre compréhension des phénomènes physico-chimiques qui assurent à ce processus un rendement quantique proche de l'unité ont énormément progressé, en s'appuyant sur des techniques d'investigations spectroscopiques de plus en plus avancées. Nous montrerons comment le panachage d'approches de biologie classique et d'investigations de physique moléculaire poussées a permis ces avancées et comment elles sont transférées aujourd'hui à des approches biomimétiques de photosynthèse artificielle, particulièrement prometteuses pour remplacer l'utilisation de combustibles fossiles et diminuer les émissions de gaz à effet de serre.

Organisation : au CEA, cantine au CEA.

9h00-12h00 (cours) : L'exposé se concentrera sur l'analyse des phénomènes moléculaires régissant la photosynthèse naturelle, et leur translation sur des photocatalyseurs capables de produire des fuels à partir de l'énergie solaire.

Une introduction sur la problématique de l'utilisation des énergies fossiles et de leur influence sur le climat sera présentée (François Marie Bréon).

13h30-17h30 : Expérience de spectroscopie résolue dans le temps et de spectroscopie vibrationnelle (deux groupes) à Saclay, avec présentation des méthodes et expérimentation en vraie grandeur sur des échantillons photosynthétiques (protéines et pigments collecteurs de lumière).

Une mesure de la dynamique des états excités par spectroscopie électronique résolue dans le temps d'un sensibilisateur de photocatalyse dans le domaine nano/microseconde sera présentée, ainsi que l'influence de l'autoassociation de ce sensibilisateur sur cette dynamique.

En spectroscopie vibrationnelle, les étudiants seront initiés aux mesures des modes vibrationnels des molécules conjuguées, ainsi qu'à leur importance dans les transferts ultrarapides électrons/excitation, et une expérimentation permettant l'accès à ces modes vibrationnels sera effectuée.

Programme

Jeudi 01/07/2021

Astrochimie

Analyse de la matière interstellaire

Intervenants : Institut d'Astrophysique spatiale (IAS): Donia Baklouti et Yann Arribard (doctorant), Laboratoire Aimé Cotton (LAC): Laurent Wiesenfeld, ISMO: Emmanuel Dartois.

Enjeu sociétal : La matière interstellaire constitue la majorité de la matière de notre Galaxie, la Voie Lactée. Le milieu interstellaire est un laboratoire physico-chimique où l'on rencontre des conditions extrêmes en températures, faibles densités et exposition au rayonnement. Il s'agit de montrer comment des avancées obtenues durant les quarante dernières années en matière d'observation astronomique et d'exploration spatiale d'un côté, et d'expérimentation en laboratoire et de techniques d'analyses physico-chimiques de l'autre, ont beaucoup fait évoluer nos connaissances sur la composition du milieu interstellaire et sur l'histoire de la matière dans le Système solaire, et posent des problématiques scientifiques complexes et des voies de recherches nouvelles pour lesquelles les compétences interdisciplinaires de physico-chimistes sont essentielles.

Organisation : le matin à l'ISMO ou l'ICP et l'après-midi à Soleil, Hall SuperAco puis retour à l'ISMO ou ICP.

9h00-12h00 (cours) : trois interventions de 45 minutes environ.

Laurent Wiesenfeld : présentation générale sur le milieu interstellaire. *Emmanuel Dartois :* composition des solides et des molécules organiques présentes dans le milieu interstellaire et dans la partie externe du système solaire. *Donia Baklouti :* l'analyse de la matière carbonée contenue dans des poussières extraterrestres primitives, *in situ* par des sondes spatiales, et en laboratoire après avoir été collectées ou ramenées sur Terre. Etudier la chimie de ces matériaux peu modifiés depuis l'accrétion des petits corps (astéroïdes et comètes principalement) dont ils sont issus, permet de remonter le temps en nous renseignant sur la formation et l'évolution de ces objets.

13h30-15h30 : visite de plateformes expérimentales

- Visite d'observation sur la ligne SMIS (spectroscopie IR) au synchrotron SOLEIL avec intervention (en anglais) du responsable de ligne, Ferenc Borondics (chimiste de formation). **Accès :** par sous-groupe de ~5 étudiants en alternance, avec une autre ligne liée à la thématique patrimoine du vendredi matin : soit PSICHE pour la tomographie et la diffraction 3D de rayons X, avec Andrew King ; soit DIFFABS pour la diffraction / absorption des rayons X, avec Solenn Reguer.

Lieu : Synchrotron SOLEIL, **Durée :** environ 1 heure par groupe (deux visites de 30 minutes)

- Visite de la plateforme Andromède (accélérateur de particules, diverses expériences dont TOF-SIMS pour l'astrochimie - <http://ipnwww.in2p3.fr/ANDROMEDE>) avec intervention du responsable du projet, Serge Della Negra.

Lieu : Hall SuperAco (entrée en face du bâtiment 210, Orsay vallée), **Durée :** 30 minutes.

Les visites seront accompagnées par Donia Baklouti et des membres de l'équipe «Astrochimie et Origines» de l'IAS. Les expériences SMIS et Andromède seront abordés lors de l'exposé «l'analyse de matière extra-terrestre dans l'espace et en laboratoire» comme exemples illustrant le propos.

Fin d'après-midi : travail personnel sur un thème choisi par l'étudiant(e) pour une courte présentation pour le lendemain après-midi sur comment ils voient le futur de la physico-chimie. **Lieu :** ISMO.

Programme
Vendredi 02/07/2021

Patrimoine / archéologie

Physico-chimie de systèmes archéologiques et du patrimoine

Intervenants : Institut photonique d'analyse non-destructive européen des matériaux anciens (IPANEMA, Soleil): Loïc Bertrand; Delphine Neff (Laboratoire Archéomatériaux et Prévion de l'Altération NIMBE / LAPA / U Paris Saclay CEA/CNRS, UMR3685).

9h00-12h00 : Enjeu sociétal et organisation du matin (2 x 1h30 de cours) : étude physico-chimique de matériaux archéologiques, des musées et d'histoire naturelle dans des travaux visant à documenter l'histoire matérielle des sociétés et des productions humaines (matériaux métalliques archéologiques, pigments, céramique, verres, textiles etc...), ainsi que les processus conduisant à l'évolution de ces vestiges au temps long, de leur milieu d'enfouissement jusqu'à celui de leur exposition ou de leur conservation. L'étude de tels matériaux, hétérogènes et altérés, requiert la mise en place de protocoles analytiques complexes multi-échelle intégrant techniques portables, instruments de laboratoire et grands instruments (microscopies, spectroscopies, imagerie spectrale), pour en extraire le maximum d'information, tout en minimisant leur altération.

Vendredi après-midi :

Présentations des étudiants devant le maximum d'intervenants sur comment ils voient l'avenir dans les différentes branches de la physico-chimie, chaque étudiant choisissant un sujet plus ou moins large qui l'intéresse.

Lieu : ISMO ou ICP.