



Lettre d'information

No. 1 (Printemps 2023 — Nancy, Metz, Saint-Avold)

UMR 7019 CNRS & UNIVERSITÉ DE LORRAINE

LE LABORATOIRE

Pour ce premier numéro, nous souhaiterions présenter brièvement le laboratoire, son histoire et sa structuration thématique.

Le Laboratoire de Physique et Chimie Théoriques (LPCT) est une unité mixte de recherche (UMR) Université de Lorraine et CNRS créée en 2018 à partir du rassemblement d'effectifs provenant de quatre unités — le laboratoire Structure et Réactivité de Systèmes Moléculaires Complexes (SRSMC), le laboratoire de Cristallographie, Résonance Magnétique et Modélisation (CRM2), l'Institut Jean Lamour (IJL) et le laboratoire de Chimie et Physique – Approche Multi-échelle des Milieux Complexes (LCP-A2MC). Les activités scientifiques du laboratoire relèvent de la théorie, de la modélisation et de la simulation dans des champs disciplinaires variés permettant l'étude de systèmes allant de l'atome aux systèmes complexes d'intérêt biologique. L'ensemble de cette activité de recherche a en commun la pratique d'une science formalisée, et pour beaucoup de collègues le calcul numérique.

L'unité est actuellement composée de 8 ITA/BIATSS, ainsi que d'un effectif enseignant-chercheur permanent de 38 personnes et non-permanent de 32 personnes (26 en préparation d'un doctorat, 5 en post-doctorat, et

1 ATER). Approximativement deux tiers de l'unité sont localisés sur le site nancéen en Meurthe-et-Moselle, et l'autre tiers de l'unité est localisé en Moselle, à Saint-Avold et Metz. En cinq années d'existence, le laboratoire a vu ses effectifs permanents récompensés par onze promotions, et augmentés par dix entrées par voie de recrutement, migration interne ou mutation.

L'UMR est actuellement structurée en cinq axes disciplinaires : l'axe *Biophysique et biochimie* a une orientation thématique portée sur les systèmes relevant du vivant (ADN, protéines, membranes, etc.) ; l'axe *Dynamique et symétrie* fédère en son sein des travaux de physique théorique relevant de la physique statistique, quantique ou mathématique, ainsi que de la physique de la matière molle ou condensée ; l'axe *État liquide, interfaces, solvation* regroupe les études relevant principalement de la photocatalyse, du nanoconfinement et de la réactivité aux interfaces ou en milieu supercritique ; l'axe *État solide, structure et propriétés* est composé d'effectifs dont la préoccupation scientifique est l'étude de systèmes étendus, avec pour champs disciplinaires principaux la cristallographie, la catalyse et le magnétisme ; l'axe *Interaction rayonnement-matière* regroupe des personnes dont les travaux portent sur la physique des collisions, la photochimie et la photophysique. Deux axes transverses existent également au

LPCT, à savoir l'axe *Développements numériques et théoriques* qui concerne l'ensemble des activités de développement théorique et algorithmique déployées dans les axes de recherche principaux du laboratoire, et l'axe *Didactique, épistémologie et interdisciplinarité* qui regroupe des personnes impliquées dans la médiation scientifique, l'innovation pédagogique, ou qui font des recherches traitant d'histoire et de philosophie des sciences ou encore à l'interface entre la chimie et la linguistique.

Le laboratoire s'est doté en 2023 d'un nouveau site web : lpct.cnrs.fr.

ARRIVÉES RÉCENTES

L'année 2022 a vu l'arrivée de nouvelles personnes au LPCT, et nous souhaiterions vous les présenter.

Charlotte Stenger est gestionnaire et localisée sur le site de Metz. Elle partage son temps de travail à 70 % au LPCT et 30 % à l'Institut Jean Lamour. Elle s'occupe actuellement des missions au sein du laboratoire.

Francesco Talotta est maître de conférences section 30, localisé sur le site de Metz et rattaché à l'axe Interaction rayonnement-matière. Ses recherches portent sur l'étude théorique statique et dynamique des mécanismes de réactions qui impliquent des molécules dans les états excités, telles que les réactions de photochimie et les collisions. Le développement et l'extension des

nouvelles méthodes d’approximation quantiques-classiques, telles que la théorie de la factorisation exacte pour résoudre l’équation de Schrödinger dépendante du temps, font également partie de ses activités scientifiques.

Thérèse Malliavin est directrice de recherche CNRS en section 16 et est arrivée au LPCT par voie de mutation depuis l’Institut Pasteur, elle est rattachée à l’axe Biophysique et biochimie. Le travail de recherche de Thérèse se situe en bioinformatique structurale et est organisé autour de deux axes principaux : (i) application des outils de la dynamique moléculaire à l’étude des processus biologiques impliquant la mobilité interne des protéines ; (ii) développement d’une approche originale, basée sur la géométrie des distances, pour dénombrer systématiquement les conformations des protéines.

Emmanuelle Bignon a été recrutée par le CNRS en section 13 avec un rattachement au LPCT dans l’axe Biophysique et biochimie. Emmanuelle développe une nouvelle thématique de recherche portant sur la compréhension des facteurs épigénétiques qui modulent la compaction de l’ADN dans les cellules. Ses projets se focalisent sur les modifications post-traductionnelles oxydatives (glutathionylation, nitrosylation, sulfenylation...) dont le rôle est encore très mal compris. À l’aide de méthodes de dynamique moléculaire classique et QM/MM et en collaboration avec des experts en cryo-microscopie électronique de l’IGBMC, elle a pour but de définir les mécanismes de formation de ces modifications au premier niveau de compaction de l’ADN (le nucléosome, formé d’ADN enroulé autour de protéines histones), et d’évaluer leur effet sur la dynamique de l’ADN au sein du nucléosome ainsi que sur la liaison à des protéines impliquées dans les phénomènes de transcription, réplication et réparation de l’ADN. Elle collabore également sur des projets annexes avec le CRM2 (hydrogels d’acides nucléiques peptidiques), le L2CM (composés intercalants de l’ADN), et l’Université de Namur (dichroïsme circulaire de complexes

protéine/ADN).

Le 1er mars 2023, un nouveau collègue, **Cyril Elouard**, est arrivé au LPCT, dans l’axe Dynamique et symétrie, sur une chaire de professeur junior. Après une thèse soutenue à Grenoble en 2017, Cyril a effectué deux séjours post-doctoraux, l’un à Rochester et l’autre à l’INRIA. Sa thématique de recherche est la thermodynamique quantique — i.e., l’étude des effets propres au monde quantique dans les machines thermiques — et l’information quantique : effet de la mesure quantique (dont la théorie de la mesure faible), contrôle quantique et systèmes quantiques ouverts. On trouvera davantage d’informations sur les recherches de Cyril dans les *repositories* arXiv [2207.04850](https://arxiv.org/abs/2207.04850) et [1607.02404](https://arxiv.org/abs/1607.02404).

Huit nouvelles personnes — cinq en préparation d’un doctorat et trois en post-doctorat — ont rejoint le LPCT entre l’automne 2022 et le printemps 2023 : **Attila Takacs** a entamé une thèse avec Jérôme Dubail sur un financement IDEX/I-SITE (LUE), la thèse se déroule avec la co-direction de Pasquale Calabrese à SISSA (Trieste, Italie), et portera sur l’étude de la dynamique d’intrication dans des modèles quantiques à plusieurs corps suffisamment simples pour être traités théoriquement tout en ayant une pertinence expérimentale. Ces modèles sont par exemple ceux des gaz quantiques unidimensionnels, comme ceux que l’on rencontre typiquement dans des gaz d’atomes froids piégés par des lasers ou des champs magnétiques. Il a été établi par le passé que les lois de conservation influençaient très fortement la (thermo)dynamique de ces systèmes, il est donc prévu de s’intéresser, pour ces systèmes, à ce qui est aujourd’hui communément appelé leur hydrodynamique généralisée-quantique, i.e., l’étude de l’évolution de l’occupation des quasi-particules dans l’espace des phases.

Marziogiuseppe Gentile a entamé une thèse avec Jean Christophe Tremblay et Francesco Talotta sur un financement IDEX/I-SITE (LUE). Au cours de cette thèse, il est prévu de simuler la photosensibilisation de brins d’ADN induite par des chro-

mophores qui sont sensibles aux modifications de leur environnement, tels que la palmatine, ou les chevaux de Troie, tels que les nucléobases oxydées. Il y sera donc proposé d’étudier la compétition entre les mécanismes de conversion inter-système et de désactivation non-radiative, ainsi que leur modulation induite par l’environnement des acides nucléiques. Ceci revêtira une importance particulière pour la palmatine, pour laquelle le croisement inter-système est favorisé par l’interaction avec l’ADN tandis que la luminescence est privilégiée en solution. Les systèmes seront traités selon une approche multi-échelle par le biais de simulations de dynamique dite de “state-hopping”, plus particulièrement en utilisant l’approche QM/MM implémentée dans le code SHARC, qui permet d’inclure les effets environnementaux dans la dynamique. Cette thèse sera également co-encadrée par Leticia Gonzalez de l’université de Vienne, docteur honoris causa de l’université de Lorraine en 2018, ainsi qu’Antonio Monari, un ancien membre permanent du LPCT, maintenant à Paris Cité.

Marta Cantina a commencé une thèse — contrat doctoral UL — avec Mariachiara Pastore sur la modélisation du mouvement moléculaire dans des agrégats dans le cadre de la thérapie photothermique. Le projet de thèse, en collaboration avec un groupe expérimental au laboratoire L2CM à Nancy qui préparera et testera les systèmes pour la thérapie photothermique (PTT), porte sur l’application et la généralisation au cas des agrégats PTT d’une stratégie de calcul multi-échelle, récemment développée dans le cadre de la collaboration entre le LPCT et l’ICCOM-CNR en Italie, capable de prédire les variations des propriétés photophysiques allant de la molécule en solution aux agrégats supramoléculaires. Dans cette approche mixte quantique-classique, les effets vibroniques, les couplages inter-états, les interactions électrostatiques intermoléculaires et avec les molécules de solvant, et les effets dynamiques sont simultanément pris en compte.

Rohith Ravi a commencé sa thèse avec Mounir Tarek sur les assemblages de lipides-et-peptides mimétiques d'apolipoprotéine dans le cadre d'un projet ANR (plus d'informations à ce [lien](#)). Il va appliquer des outils théoriques pour étudier les paramètres physiques et structuraux de nano-assemblages de lipides-peptides mimant les lipoprotéines à haute densité. En particulier, les assemblages de lipides-et-peptides mimétiques d'apolipoprotéine ayant un intérêt médical seront assemblés en choisissant spécifiquement les lipides ayant une composition optimisée, ainsi qu'en faisant varier le ratio lipide/peptide. Des modélisations atomistiques assistées par ordinateur seront associées à des travaux de collaborateurs expérimentateurs pour étudier les propriétés structurales et dynamiques de ces systèmes. Des études plus fondamentales seront également réalisées relativement au *design* de tels systèmes biologiquement actifs.

Stéphanie Egome Nana a commencé une thèse financée par la région Grand Est avec Ugo Ancarani et Arnaud Leclerc ; son projet de thèse consiste à développer un modèle théorique de fonctions d'onde du continuum, décrivant un électron s'échappant d'une molécule. Basée sur des combinaisons de fonctions gaussiennes complexes centrées sur plusieurs points, l'approche proposée devrait faciliter les calculs d'observables relatives à différents phénomènes dans lesquels les états de continuum jouent un rôle prépondérant, tels que la photoionisation moléculaire, l'ionisation par impact d'électron, ou encore la génération d'harmoniques élevées.

Souloke Sen a été recruté comme postdoctorant par Mariachiara Pastore sur un projet FEDER sur la modélisation *ab initio* des matériaux et procédés aux interfaces solide/liquide pour applications photocatalytiques (plus d'informations à ce [lien](#)). Le projet porte sur la modélisation, par des approches basées sur la DFT, de la structure, de la structure électronique et de l'activité photocatalytique des interfaces NiO-fonctionnalisées/eau pour la production de H₂. Les sim-

ulations concernent la détermination des modèles structurels appropriés (défauts, reconstruction de surface, hydroxylation, etc.) et la caractérisation de l'alignement des niveaux d'énergie à l'interface solide/liquide. Le contrat postdoctoral est partagé avec le CNR-IOM à Trieste (Italie) avec la participation de Simone Piccinin.

Halima Said a été recrutée en tant que postdoctorante mi-décembre 2022 sur la chaire MULTIMINES (*vide infra*). Elle a pour mission de développer des MLFF (*machine learning forcefields*) pour décrire l'adsorption de réactifs de flottation sur les minéraux de gangues impliqués dans la flottation des minerais de fer : quartz, kaolinite, calcite, dolomite. Elle utilise l'*active learning* récemment implémentée dans le code VASP qui a pour but d'entraîner le champ de force sur la base d'une dynamique moléculaire *ab initio*. Il lui faut décrire correctement tour à tour la surface minérale hydratée puis en présence de cations de type Na⁺, Ca²⁺, puis de collecteurs de type amine.

David Dell'Angelo a été recruté fin janvier 2023 en tant que postdoctorant sur la même chaire. Il développe lui aussi des MLFF pour les minéraux porteurs de fer principalement : hématite, magnétite, goéthite. Pour cela, il utilise deux approches différentes, l'*active learning* d'une part, et du Machine Learning Interacting Potential (MLIP) qui utilise des réseaux de neurones et des simulations de dynamique moléculaire classique.

SOUTENANCES

Le 30 août 2022, **Ebenezer Kemgang** a soutenu sa thèse intitulée *Particules dipolaires sous champs extérieurs*, thèse réalisée en codirection entre René Messina et Hervé Mohrbach. Ce travail de thèse théorique visait à comprendre l'influence des stimuli externes (champ magnétique, gravité, confinement) ainsi que des effets thermiques sur l'auto-assemblage d'un ensemble de particules dipolaires magnétiques.

Un premier objectif visait à prédire les comportements de structures des états fondamentaux de l'assemblé de N billes magnétiques en fonction des champs extérieurs appliqués. Un modèle à deux corps où deux particules magnétiques sont exposées aux champs gravitationnel et magnétique au voisinage d'un substrat fut donc étudié. Dans ce modèle, les orientations des moments magnétiques des états fondamentaux furent aussi explorées, et les conditions de dimérisation prédites à travers un riche diagramme de phases. Une étude à N corps a aussi été menée à champ magnétique fort adressant notamment la fragmentation de structures colonnaires magnétiques sous l'effet de la gravité. Un second axe de recherche fut consacré à l'étude de l'influence des fluctuations thermiques sur l'agrégation des particules confinées par le biais de la théorie et des simulations.

Valentin Anfray a soutenu sa thèse à Nancy en octobre 2022, intitulée *Étude numérique du point critique de systèmes quantiques de spins désordonnés en dimensions élevées*, et réalisée sous la direction de Christophe Chatelain. Parmi les modèles de spins quantiques désordonnés, Valentin a notamment étudié ceux de dimensions supérieures à un par le groupe de renormalisation en désordre fort. Pour cela, il a implémenté un algorithme permettant de considérer des systèmes contenant de l'ordre d'un million de spins indépendamment de la dimension du réseau. Il a également montré que les propriétés critiques du modèle de Potts quantique désordonné à 2, 3, 5, 10, 20 et 50 états en dimensions deux et trois sont gouvernées par un point fixe de désordre infini. Il a estimé les exposants critiques de la longueur de corrélation, de l'aimantation et du gap d'énergie. En exploitant les effets de taille finie et en prenant en compte les corrections, il a mis en évidence que les propriétés critiques du modèle de Potts sont indépendantes du nombre d'états. Il a également étudié le modèle d'horloge quantique désordonné à 2, 3, 5, 8 et 10 états en dimensions deux et trois.

L'importance du désordre initial a été mis en évidence pour pouvoir atteindre un point critique de désordre infini. Enfin, il a étudié le point tricritique du modèle d'Ashkin-Teller quantique désordonné en dimensions deux et trois, et montré que l'exposant de la longueur de corrélation dans une des directions instables n'appartient pas à la classe d'universalité du modèle d'Ising quantique désordonné.

Le 6 décembre 2022, notre collègue **Jérôme Dubail** a soutenu son Habilitation à Diriger les Recherches (HDR) intitulée *Descriptions à grande échelle du gaz de Bose 1D & certains autres problèmes en physique quantique en basse dimension*. Quelques informations concernant notamment la composition de son jury sont données à ce [lien](#). Dans cette thèse d'habilitation il décrit les principaux résultats obtenus avec ses co-auteurs, à la fois sur les développements de la théorie et sur son application aux expériences d'atomes froids. En particulier, il discute ses tentatives récentes d'incorporation des effets des fluctuations quantiques dans les gaz quantiques hors équilibre dans ce cadre théorique de l'hydrodynamique généralisée. Il présente également quelques résultats sur d'autres sujets en physique quantique à N corps en basse dimension. Ceux-ci incluent quelques résultats fondamentaux sur l'"intrication d'opérateurs", un indicateur de la complexité des opérateurs quantiques et de leur approximabilité par des "Matrix Product Operators" dans les systèmes quantiques en une dimension, ainsi que des résultats sur les phases topologiques chirales en deux dimensions — par exemple les états d'effet Hall, les isolants de Chern ou les superfluides $p+ip$ — du point de vue de leurs propriétés d'intrication.

Vishal Kumar Porwal a soutenu sa thèse, intitulée *Outils théoriques pour étudier la solvatation dans des phases liquides et nanoconfinées* et dirigée par Francesca Ingrassio, à Nancy le 12 décembre 2022. Vishal a, durant sa thèse, élaboré des outils théoriques pour étudier la solvatation dans des phases liquides et nanoconfinées. Son projet

de thèse était consacré au développement de stratégies computationnelles *ad hoc* pour parvenir à une interprétation moléculaire de l'impact de l'environnement sur les propriétés conformationnelles, vibrationnelles et optiques de molécules organiques. En collaboration avec un groupe expérimental, il a analysé le comportement d'anions organiques confinés dans des matériaux argileux. En se focalisant sur l'évolution des bandes carboxylates avec l'augmentation de l'hydratation, il a caractérisé les changements des modes de liaison de l'anion avec la surface en utilisant des simulations de dynamique moléculaire classique. La deuxième partie du projet, réalisée avec des collaborateurs italiens, est basée sur une approche intégrée multiniveau pour obtenir un champ de force sophistiqué du 2,2'-bipyridine-3,3'-diol. Cette molécule subit un transfert de proton intramoléculaire à l'état excité, et les données expérimentales indiquent une sensibilité de ses propriétés à un environnement nanoconfiné. Son étude préliminaire de la surface d'énergie potentielle et du spectre d'absorption dans l'eau par une approche séquentielle classique-quantique permettra des progrès significatifs sur la caractérisation des équilibres tautomères et sur leur effet sur les propriétés optiques du chromophore. Vishal a rejoint le groupe de Pierre-Alexandre Glaude au LRGP pour un postdoc sur la destruction de toxiques

Tom Miclot a soutenu sa thèse de doctorat intitulée *Modélisation de l'influence des lésions de l'ADN sur la régulation de l'expression génique* le 12 décembre 2022 à Palerme, en Sicile. Pendant les trois dernières années, Tom a préparé sa thèse en chimie en cotutelle entre l'Université de Lorraine et l'Université de Palerme, sous la direction d'Antonio Monari et de Giampaolo Barone. Le sujet de recherche de Tom portait sur la modélisation et la simulation de quadrupeles de guanine et leurs interactions avec des protéines et des peptides. Les recherches menées par Tom ont permis de montrer que les quadrupeles de guanine sont extrêmement

résilients face à la présence de lésions oxydatives, ce qui ouvre des perspectives intéressantes dans la compréhension des mécanismes pouvant engendrer le développement des cancers. Par ailleurs, Tom s'est aussi intéressé à la présence de quadrupeles dans les génomes des virus, obtenant en particulier la première structure résolue au niveau atomique d'un quadrupele dans l'ARN de SARS-CoV-2. Après sa thèse, Tom a rejoint le Heyrovský Institute of Physical Chemistry à Prague en tant que chercheur postdoctoral.

Le 14 décembre 2022, **Volkan Findik** a soutenu sa thèse de doctorat intitulée *Simulations atomistiques de la réaction d'acétylation d'amines et de l'inhibition covalente de l'enzyme Phosphoinositide 3-kinase (PI3K)*. Cette thèse a été réalisée en cotutelle entre l'université de Lorraine et l'université de Marmara en Turquie, impliquant la co-direction de notre collègue Manuel Ruiz-Lopez et de Safiye Erdem. L'objectif principal de cette thèse fut d'élucider le mécanisme de l'inhibition covalente de PI3K δ par des inhibiteurs ester afin d'aider à la conception future de nouveaux inhibiteurs avec des activités supérieures. Avant les études mécanistiques sur l'enzyme, des calculs *ab initio* et DFT furent d'abord effectués sur la réaction modèle entre la méthylamine et les acétates de méthyle, phényle et p -NO₂ phényle en solution aqueuse. Les mêmes systèmes modèles ont ensuite été étudiés par l'approche de dynamique moléculaire QM/MM "à double niveau". Ensuite, une approche ONIOM QM:QM a été appliquée pour obtenir les mécanismes de réaction envisageables dans ce site actif. Ces calculs ont permis d'affiner les mécanismes de réaction dans l'environnement enzymatique qui confirment globalement les étapes obtenues à partir du petit système modèle. Ces informations furent utilisées pour aborder une étude QM/MM dynamique sur l'enzyme en utilisant le même protocole "double niveau" établi pour le petit système modèle, ce qui a permis d'obtenir le profil d'énergie libre du

mécanisme d'inhibition de PI3K δ pour le dérivé p -NO₂ de l'inhibiteur ester.

Ayoub Daouli a soutenu sa thèse le 6 janvier 2023 à Khourigba, au Maroc. Intitulée *Ab initio exploration of materials for the selective detection and capture of iodine and nitrogen oxide species*, cette thèse a été réalisée en cotutelle entre l'Université Sultan Moulay Slimane (Abdellatif Hasnaoui) et le LPCT (Michael Badawi). Elle a été financée par le projet Hubert-Curien (PHC) TOUBKAL dans lequel Sébastien Lebègue et Mariachiara Pastore sont également associés. Des études récentes avaient révélé que les zéolithes peuvent permettre une capture efficace des NO_x, qui peuvent être particulièrement nocifs dans un environnement de travail confiné sans ventilation ni traitement. Des calculs DFT périodiques ont démontré que, parmi une série de zéolites échangées par des cations divalents, la Faujasite Y-Pt²⁺ est un matériau intéressant pour l'adsorption sélective des NO_x issus des gaz d'échappement des moteurs diesel en présence de vapeur d'eau. Ayoub a ensuite étendu son exploration aux MOFs en intégrant les mêmes cations en tant que métaux dans le ligand catéchololate avant son incorporation dans l'UiO-66 en forme de cage. Des simulations GCMC mettant en œuvre un champ de force NO_x/MOF ont été déployées pour comprendre en profondeur le mécanisme microscopique en jeu. Nos simulations moléculaires indiquent que l'UiO-66-CatFe(II) nanoporeux serait un excellent adsorbant pour la capture des NO_x, même à une très faible concentration de quelques ppm.

Le 2 mai 2023, **Juliette Lainé** a soutenu sa thèse CIFRE intitulée *Approches multi-échelles pour la flottation inverse des minerais de fer : cas de la kaolinite*, dirigée par Michaël Badawi. Son projet de thèse proposait une organisation originale multi-échelle "modélisation moléculaire ; étude expérimentale de l'interface ; procédé de séparation" couplant calculs intensifs de chimie quantique et étude expérimentale de la synergie induite sur la séparation par l'utilisation de formulations de molécules de struc-

ture différente. Les premières étapes du projet furent consacrées à la modélisation quantique des surfaces des minéraux impliqués, leur hydratation et l'adsorption de réactifs de flottation. Ces résultats seront validés par des techniques d'observation et de mesure de physico-chimie des surfaces, comme la réalisation d'isothermes d'adsorption et de spectroscopie infrarouge. Des essais de flottation systématiques furent réalisés à différentes échelles afin de tester la sélectivité et le rendement de nouvelles formulations de collecteurs. Cette tâche a pour objectif de tester des formulations déduites des résultats de modélisation et des observations et mesures de surface. Finalement, tout un procédé de floculation-flottation a été re-testé pour les minerais de fer.

DÉCÈS

Nous avons la tristesse de vous informer du décès de **Loïc Turban**. Loïc était un physicien talentueux et intègre. Un maître, qui mettait en avant ses élèves plutôt que lui-même. Il faut dire que c'est assez conforme avec sa timidité et la conviction qu'il avait de ne pas être un bon orateur, ce que ses étudiants peuvent infirmer et ne se sont d'ailleurs pas privés de faire. Il s'est mis à faire de la physique théorique, paraît-il, lorsqu'il s'ennuyait à attendre des résultats de mesures d'électromigration qui prenaient un temps fou. La patience n'a probablement jamais été un point fort pour Loïc ! Et c'est heureux, car il s'est alors lancé dans l'étude de la percolation et des phénomènes critiques, à l'époque des travaux pionniers sur l'hypothèse d'homogénéité, le groupe de renormalisation et l'universalité. Il s'est régalé avec des solutions exactes, manipulant la combinatoire, les fonctions génératrices, les idées de dualité ou de la renormalisation exacte. Il a créé des extensions de modèles sur réseau célèbres. Il existe d'ailleurs un modèle de Turban dans lequel Loïc a montré que l'on pouvait généraliser les interactions entre spins pour enrichir le diagramme de phase d'un modèle d'Ising ou de Potts et pourtant contin-

uer à obtenir des résultats exacts en deux dimensions. Loïc s'est passionné pour l'invariance conforme, les chaînes quantiques intégrables, les marches aléatoires. Poussant certains résultats de l'invariance conforme dans leurs derniers retranchements, la fameuse relation gap-exposant en particulier, il en a testé la validité en brisant les conditions *a priori* requises en imposant des perturbations marginales, apériodiques, désordonnées, parfois marginales et apériodiques, ou apériodiques et désordonnées. Car c'est un autre élément du charme de Loïc et de sa conception de la physique. Il étudiait... ce qui l'intéressait lui-même et se moquait éperdument que ce soit ou non à la mode, ou qu'ils soient deux, parfois trois personnes au monde à s'intéresser à un problème donné. Et parfois, il avait de la suite dans les idées et pouvait revisiter des années plus tard une nouvelle extension d'un problème qu'il avait déjà lui-même généralisé dans sa jeunesse.

Loïc a fait sa carrière scientifique à Nancy (École des Mines, Faculté des Sciences), toujours minoritaire à être théoricien au Laboratoire de Physique des Solides, de Métallurgie Physique et Sciences des Matériaux, à l'Institut Jean Lamour. Les dernières années, il a participé à l'aventure du Laboratoire de Physique et Chimie Théoriques. Il a créé à la fin des années 90 le Groupe de Physique Statistique, devenu un axe de recherche du LPCT qui compte aujourd'hui une douzaine de chercheurs permanents. Comme directeur de thèse, Loïc était exigeant. Il pouvait appeler ses thésards à tout moment et poursuivre une conversation là où elle s'était interrompue quelques heures ou quelques jours plus tôt. Il était très attaché à la qualité de rédaction et au sérieux des arguments. Mais il était très généreux et à une époque où l'université comprenait nombre de mandarins, il en était l'exact opposé. Il cherchait à émanciper ses étudiants, à les rendre indépendants au plus vite et ne s'imposait pas dans des collaborations. Nous sommes plusieurs dans notre laboratoire à lui devoir beaucoup.

DOCTORAT HONORIS CAUSA
ET
PROFESSEURS INVITÉS

Le titre et l’insigne de docteur *Honoris Causa* ont été remis à **Pasquale Calabrese**, professeur de physique théorique et physique statistique quantique à l’université de Trieste et collaborateur du LPCT de longue date, notamment de Jérôme Dubail — parain de M. Calabrese —, lors d’une cérémonie qui s’est tenue le 21 novembre 2022 à Nancy, animée par Dragi Karevski. Les détails de la cérémonie, ainsi qu’une vidéo de celle-ci sont disponibles en cliquant sur ce [lien](#).

Michaël Badawi a par ailleurs accueilli à Saint-Avold comme professeur invité **Adrià Bonilla-Petriciolet** tout le mois de septembre 2022. Adrià est professeur au Mexique au sein de l’Instituto Tecnológico de Aguascalientes. Il mène ses recherches sur la thermodynamique appliquée, l’optimisation des procédés et l’adsorption pour le traitement de l’eau et les applications énergétiques. Pendant son séjour à Saint-Avold, il a modélisé des isothermes d’adsorption du phénol sur ZnO par des approches de physique statistique et des réseaux de neurones. En combinant ce travail avec les simulations de dynamique moléculaire *ab initio* menées par Ayoub Daouli et Juliette Lainé, ils ont mieux compris l’évolution des modes d’adsorption du phénol en fonction de sa concentration surfacique. Adrià a aussi contribué à monter et améliorer le dispositif expérimental d’isothermes d’adsorption en phase liquide.

La collaboration de notre collègue Malte Henkel avec **Stoimen Stoimenov** (IRNRE, Académie des Sciences, Sofia, Bulgarie) est de longue date. Lors de sa dernière visite en avril 2023 au LPCT, ils ont étudié les symétries dynamiques des systèmes avec un grand nombre de degrés de liberté hors équilibre. Par exemple, il est connu depuis longtemps que la cinétique de remise en ordre de phases (qui se réalise après une trempe d’un système désordonné vers le régime de coexistence d’au moins

deux états ordonnés) est décrite par la symétrie dynamique du groupe de Schrödinger. Leur travail récent a visé la généralisation de ces symétries dans le cas où un transport balistique est également présent. Ceci mène vers deux nouveaux groupes de symétrie : d’abord les symétries méta-conformes, puis les symétries méta-Schrödingeriennes. Ils ont trouvé que dans le cas des corrélations initiales de longue portée, et en considérant des distances beaucoup plus grandes que celles requises pour pouvoir observer les conséquences d’une invariance de Schrödinger, des modèles de spin avec biais, comme le modèle d’Ising biaisé et le modèle sphérique biaisé, montrent bien des évidences en accord avec les prédictions des symétries méta-conforme et méta-Schrödingerienne. Ainsi, ils peuvent formuler un algorithme permettant d’identifier de telles symétries dans la relaxation d’autres systèmes biaisés. Pour plus d’informations sur le modèle d’Ising biaisé, veuillez consulter le repository arXiv [1810.09855](#) ; l’algèbre de Lie méta-Schrödinger est quant à elle construite dans le repository arXiv [2112.14143](#), et un preprint sur l’application au modèle sphérique biaisé est en cours de rédaction.

PARUTIONS RÉCENTES

En 2022, nos collègues **Thierry Gourieux** et **Dragi Karevski** ont chacun publié un ouvrage chez Ellipses — T. Gourieux, *Cinématique et dynamique classiques du point matériel* ; D. Karevski, *Physique quantique des champs et des transitions de phase* — et notre collègue **Jean Christophe Tremblay** a co-édité le dix-septième volume de SPR Chemical Modelling de la *Royal Society of Chemistry* avec Hilke Bahmann.

Nous souhaiterions également mettre à l’honneur la publication de nos collègues **Marilia Martins-Costa** et **Manuel Ruiz-Lopez**, intitulée *Fast Sulfate Formation Initiated by the Spin-Forbidden Excitation of SO₂ at the Air–Water Interface*, parue dans le *Journal of the American Chemical Society*, et consultable à ce

[lien](#). Ce travail a permis de mettre en évidence un nouveau mécanisme d’oxydation du dioxyde de soufre atmosphérique en sulfate, et donc une nouvelle voie de formation de pluies acides. Il s’agit d’un mécanisme photochimique qui met en jeu un état excité triplet du dioxyde de soufre. À la surface de gouttelettes d’eau, celui-ci réagit immédiatement pour former l’acide fort HOSO, puis l’ion sulfate. Contrairement aux mécanismes non-photochimiques classiques, le mécanisme décrit ne nécessite pas de catalyseurs ou d’oxydants autres que l’oxygène atmosphérique. L’élucidation du processus a été possible grâce à une collaboration multinationale entre des chimistes théoriciens du LPCT à Nancy, du CSIC à Barcelone (Espagne) et de l’université de Pennsylvanie (États-Unis), et des expérimentateurs de l’université de Nankai, en Chine.

GDR & IEA

Le Groupement De Recherche (GDR) SolvATE — pour *Solvation : Avancées Théoriques et Expérimentales* —, financé par l’Institut National de Chimie du CNRS depuis 2018, a été renouvelé pour cinq années supplémentaires à partir de janvier 2023 sous la direction de notre collègue **Francesca Ingrosso**. Pour plus d’informations, nous vous suggérons de consulter ce [lien](#).

Ajoutons également qu’un projet *International Emerging Action* (IEA) CNRS a vu le jour entre le LPCT et l’université d’Ottawa, notamment à travers une co-direction de thèse et la visite à Nancy d’**Anna Ananchenko**. Ce projet porte sur l’étude de la modulation par les lipides de la fonction des canaux pentamériques activés par des ligands.

RENCONTRES SCIENTIFIQUES

En janvier 2023 s’est tenu le meeting annuel du programme de recherche international (*International Research Program*) joignant les efforts de recherche de membres du LPCT

et du Beckman Research Institute for Advanced Science and Technology (University of Illinois at Urbana-Champaign), à propos duquel plus de renseignements sont disponibles à ce [lien](#).

Nos collègues du LPCT ont également participé au *kick-off* meeting de l'ANR NUC-STRESS (pour *étude multi-échelle des changements architecturaux et de dynamique du nucléoïde induits par le stress*) à propos de la dynamique du génome bactérien en réponse au stress. Le site web du projet est consultable à ce [lien](#).

Notons que le LPCT a co-organisé en octobre 2022 le RegioMeeting Rhénan de Biologie Structurale ; plus d'informations peuvent être trouvées au bout de ce [lien](#). Il s'agit de la trente-cinquième édition de cette rencontre tri-nationale (France, Allemagne, Suisse), dont l'objectif est d'abord de faire parler les plus jeunes au milieu de collègues ayant plus d'expérience.

Depuis maintenant 10 ans, notre laboratoire est régulièrement présent au village des sciences organisé à Bouxurulles pendant la fête de la science. Cette manifestation met en relation des curieuses et curieux du bassin de vie du nord des Vosges et des scientifiques de l'UL ou du CNRS pendant une semaine. Les samedis sont consacrés à l'animation d'ateliers interactifs (auxquels ont déjà participé Emmanuelle Bignon, Leïla Moueddene, Thibaud Etienne, Mounir Tarek,...). Les dimanches des animateurs d'associations écologistes locales et un physicien, **Olivier Collet**, portent des regards croisés sur des phénomènes présents dans la nature et échangent avec les petits et avec les grands. Enfin, nos collègues Thierry Gourieux, Bertrand Berche, Christophe Chatelain, Mounir Tarek et Olivier Collet ont participé régulièrement aux conférences de partage du savoir qui jalonnent les soirées de la semaine. Ces manifestations sont soutenues par une dizaine de partenaires institutionnels et territoriaux et font l'objet d'une couverture médiatique remarquée de la part de France Inter, France 3, France

Bleu et de la presse régionale. Lors de l'édition d'octobre 2022, cet événement a rassemblé entre cinq cents et sept cents personnes.

Membre de l'association Femmes et Sciences, **Emmanuelle Bignon** a participé à deux interventions du pôle régional de l'association au mois de mars, l'une dans un collège de Rupt-sur-Moselle (88) et l'autre dans un lycée de Longlaville (54). Les élèves ont découvert des profils de femmes scientifiques par un jeu créé par l'association et basé sur le tableau des éléments, nommé Mendeleïva. Une version numérique de ce jeu est disponible en ligne à ce [lien](#), et l'activité a été relayée dans la presse locale dans une édition de Vosges matin — voir ce [lien](#).

CHAIRE INDUSTRIELLE

La chaire industrielle MULTIMINE, lancée en 2022, est un programme de recherche conjoint entre le centre de recherche d'ArcelorMittal de Maizières-lès-Metz et l'Université de Lorraine. Co-financée par ArcelorMittal, par la région Grand Est, par la métropole de Metz, par la métropole du Grand Nancy, et par le conseil général de Moselle, ce projet de 5 ans est porté par **Michaël Badawi** du LPCT et par **Yann Foucaud** du laboratoire GeoRessources (*vide infra*) et ancien post-doctorant du LPCT. Cette chaire vise à améliorer la compréhension des mécanismes moléculaires impliqués dans la flottation des minerais de fer dans le but de développer de nouvelles formulations de réactifs de flottation, plus efficaces et plus sélectives. Pour cela, des méthodes théoriques (modélisation moléculaire) et expérimentales multi-échelles de physico-chimie seront développées, mises en œuvre et combinées au cours du projet. Les objectifs sont de mieux appréhender la spéciation et l'hétérogénéité des surfaces des principaux minéraux constitutifs des minerais de fer, de mieux comprendre l'adsorption des diverses espèces présentes en flottation, de saisir l'origine des effets synergiques

observés entre les réactifs de flottation et de développer des formulations innovantes pour la flottation des minerais de fer.

SÉMINAIRES INFORMELS

En plus des traditionnels séminaires thématiques invitant des personnes extérieures à présenter leurs travaux, nous commençons à donner des séminaires dans d'autres formats que le format traditionnel : des séminaires prospectifs, informels, pendant lesquels la personne intervenant expose non pas des résultats de recherche mais les perspectives d'une recherche incluant également les questionnements qu'elles soulèvent, des séminaires thématiques *introductifs* — **Sébastien Fumeron** nous a par exemple donné un séminaire introductif intitulé *La matière noire, une énigme de la cosmologie contemporaine* —, et, une fois par mois en moyenne, des séminaires informels pendant lesquels les membres du laboratoire sont d'abord invités à partager un moment de convivialité au bar associatif étudiant PhiScience sur le campus, avant qu'une personne non-permanente du laboratoire (stagiaire de master, thésard, postdoc) ne fasse une présentation de son sujet de recherche et partage ensuite avec nous un documentaire qui lui a semblé particulièrement marquant. Dans les mois à venir, un format différent est susceptible de voir le jour : des cours introductifs donnés par quelqu'un du laboratoire à toute personne souhaitant y participer.

INFORMATIONS DIVERSES

Concluons cette première édition en mentionnant le fait qu'un ancien post-doctorant du LPCT, **Yann Foucaud**, a été recruté comme maître de conférences en minéralogie appliquée au laboratoire GeoRessources. Félicitations à lui !

CONTACT NEWSLETTER
thibaud.etienne@univ-lorraine.fr
