

INTERFACES

Directeur

Jérôme ROSSIGNOL, Jerome.Rossignol@u-bourgogne.fr

Directeur Adjoint

Bruno DOMENICHINI, Bruno.Domenichini@u-bourgogne.fr

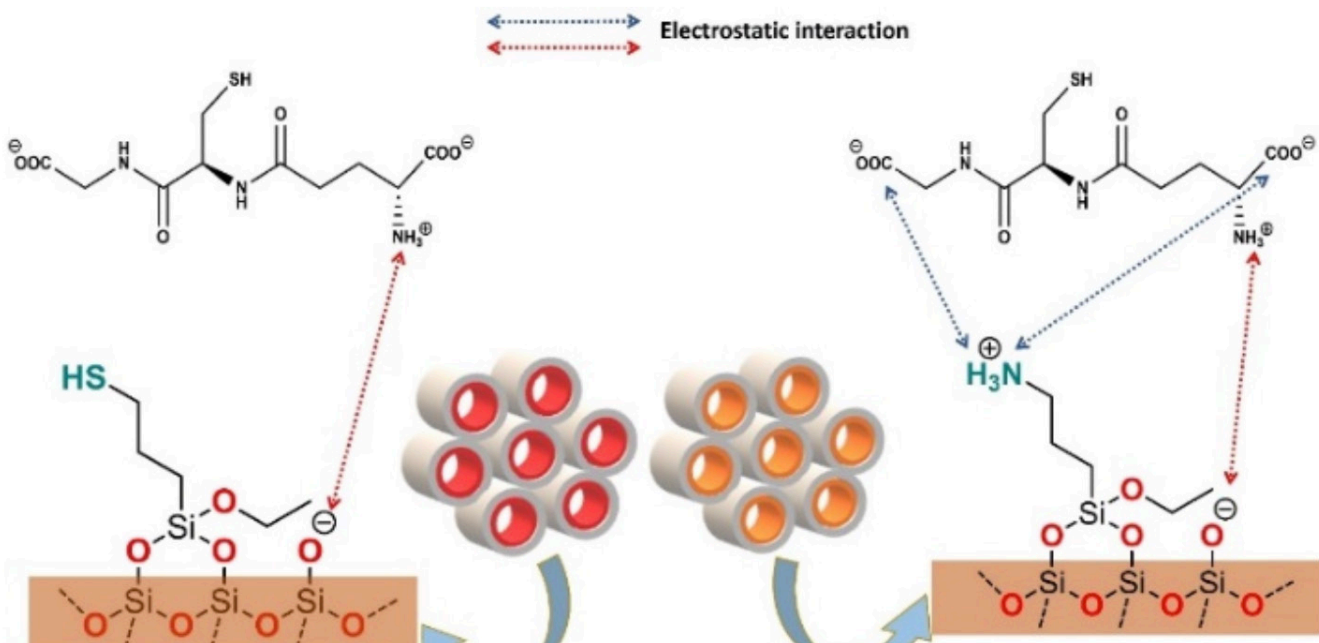
La réactivité aux interfaces (solide/solide, liquide/solide, liquide/gaz) est la clef de voûte des activités de recherches du département Interfaces regroupant physico-chimistes et chercheurs en capteurs. Les études explorent au moyen d'expériences et simulations les mécanismes d'adsorption, de transport tout en examinant les processus liés à la dissolution, à la nucléation/croissance et à la solidification.

ARTICLES

FUNCTIONALIZATION OF SBA-15 MESOPOROUS SILICA WITH AMINE AND THIOL FOR HIGHLY EFFICIENT ADSORPTION OF GLUTATHIONE FROM AQUEOUS SOLUTIONS: CHARACTERIZATION AND MODELING STUDIES

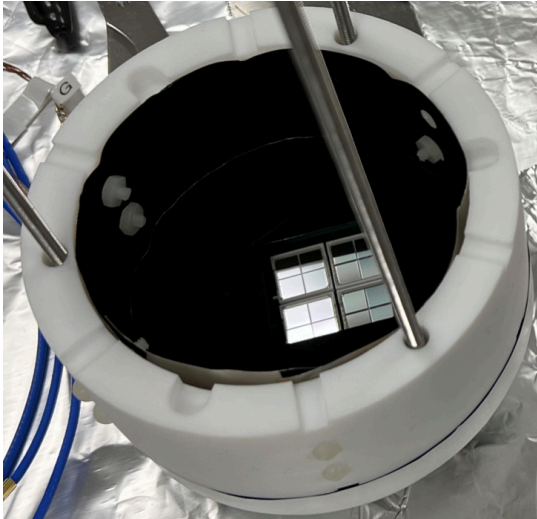
Cet article étudie l'influence de la chimie de surface de matériaux mésoporeux de type SBA-15 sur l'adsorption d'une molécule d'intérêt pharmaceutique, le glutathion. Nous avons comparé le comportement d'une silice SBA-15 non fonctionnalisée avec des silices SBA-15 fonctionnalisées avec des groupements amine (SBA-15-NH₂) ou thiol (SBA-15-SH). Quelle que soit la fonctionnalisation, l'adsorption a eu lieu principalement par des interactions électrostatiques avec une plus grande capacité d'adsorption pour la silice SBA-15-NH₂.

L. Chaabane, M. Nikolantonaki, A. Assifaoui, I. Bezverkhyy, G. Weber, and F. Bouyer Functionalization of SBA-15 mesoporous silica with amine and thiol for highly efficient adsorption of glutathione from aqueous solutions: characterization and modeling studies, *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 152 (Novembre 2023) 105169. DOI : 10.1016/j.jtice.2023.105169.



Étude de l'influence de la fonctionnalisation de silice mésoporeuse SBA-15 pour l'adsorption de glutathionne.

IMPACT OF EXTREME ULTRAVIOLET RADIATION ON THE SCINTILLATION OF PURE AND XE-NON-DOPED LIQUID ARGON



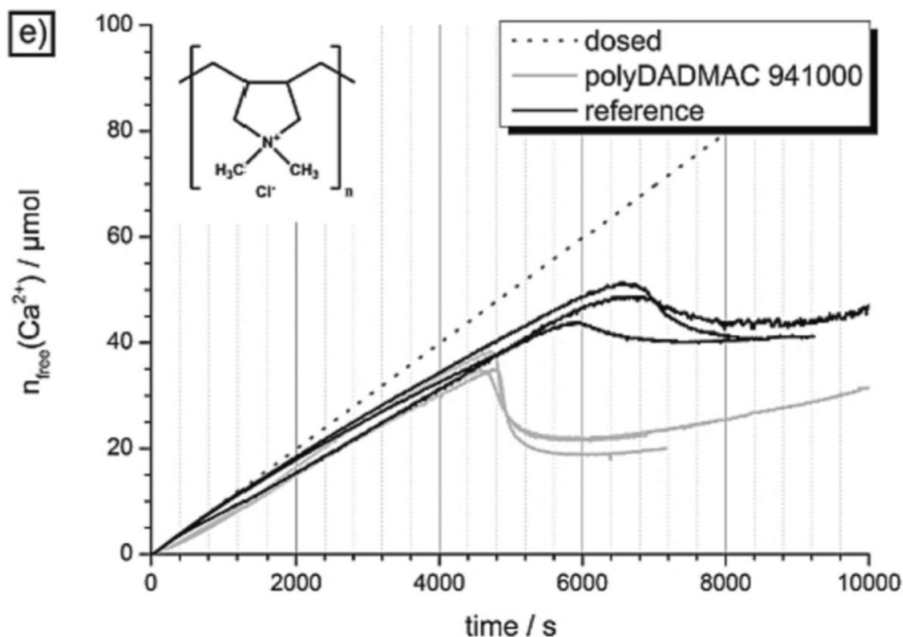
La présence de xénon améliore l'utilisation de cette technologie de détecteurs à base d'argon liquide (LAr) en la rendant plus sensible et en présentant un spectre de détection plus étendu, cela a aussi un intérêt pour des applications médicales comme pour les Positron Emission Tomography. La contribution, et le sujet la thèse de Quentin Berger, concerne principalement l'étude par simulation moléculaire des conditions de stabilité des bains d'argon qui doivent rester liquide tout en ayant une quantité de xénon importante. Ce travail est fait en collaboration avec des expérimentateurs de l'école des Mines de Paris, CEEP de Fontainebleau sur les aspects thermodynamiques et avec le consortium international Xart pour le développement des nouveaux détecteurs.

P. Agnes, Q. Berger, M. Bomben et al. *Impact of extreme ultraviolet radiation on the scintillation of pure and xenon-doped liquid argon*.

À paraître dans *Physical Review D* accessible actuellement sur ArXiv :

<https://arxiv.org/html/2410.22863v1>

NUCLÉATEUR : INFLUENCE DE POLYMÈRES SUR LA NUCLÉATION DE L'HYDRATE PRINCIPAL DU CIMENT



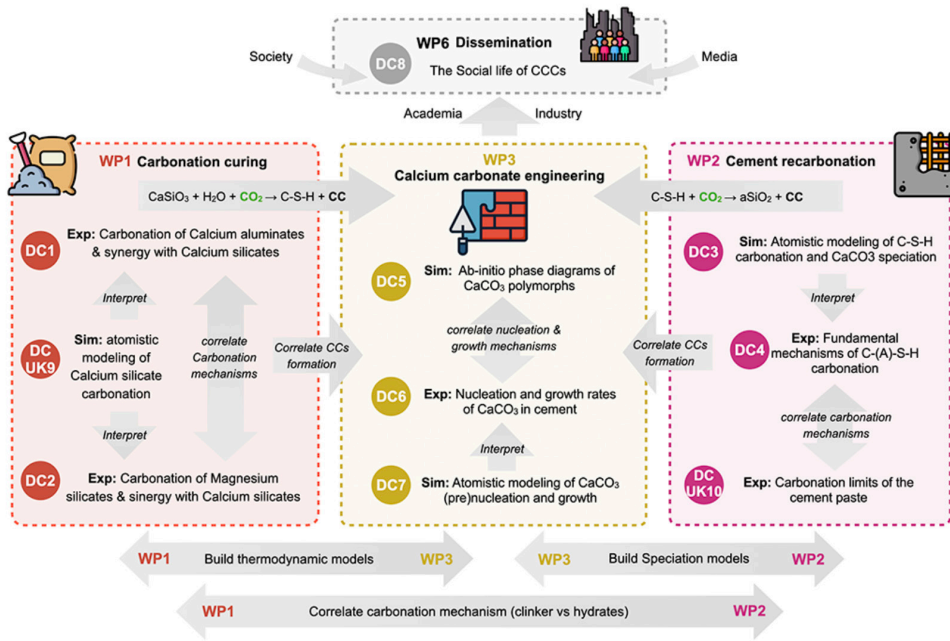
Dans une étude récente publiée dans *cement and concrete research* un nouveau polymère organique a été identifié ayant la propriété d'accélérer la précipitation de l'hydrate principal du ciment, le silicate de calcium hydraté. D'une manière générale ces molécules dites nucléateurs sont très rares. A titre d'exemple, pour le carbonate de calcium, l'un des minéraux les plus étudiés et les mieux compris en ce qui concerne la nucléation et la croissance des cristaux, aucun additif de ce genre n'a été trouvé à ce jour.

A. Picker, L. Nicoleau, A. Nonat, C. Labbez, H. Cölfen, *Influence of polymers on the nucleation of calcium silicate hydrates*, *Cement and Concrete Research* 174 (décembre 2023) 107329.

<https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2023.107329>.

FAITS MARQUANTS

ANR ASPIRIN (ANR-24-CE52-4833-02) Frédéric BOUYER (Responsable WP) : collaboration Université de Bourgogne – Université de Franche-Comté
 Dotation ANR : 689 k€ dont dotation équipe ASP : 289 k€



Les maladies inflammatoires chroniques de l'intestin (MICI) sont de plus en plus décrites comme associées à une défaillance du processus de résolution de l'inflammation. Ce projet a pour objectif de développer des leurres à base de particules de silice fonctionnalisées par des groupements de type sérine afin de mimer des corps apoptotiques et ainsi réenclencher la résolution au niveau des lésions intestinales par l'administration orale de substituts et ainsi régénérer le tissu.

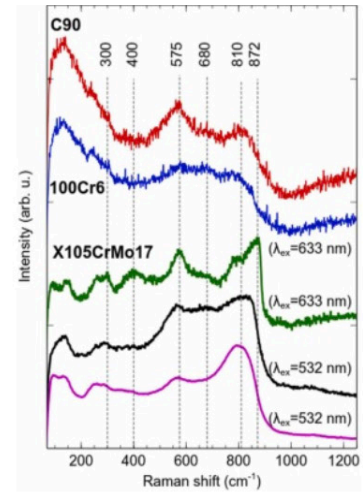
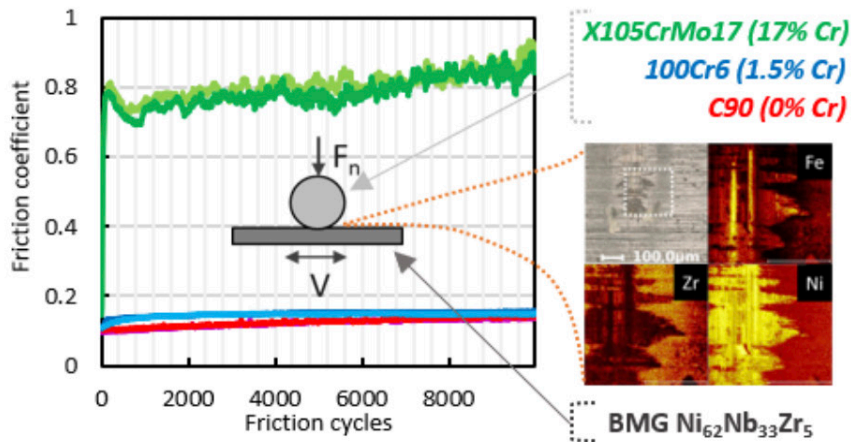
Projets européens :

Le projet Européen CONTRABASS (101119715, HORIZON-MSCA-2022-DN-01) pour « Zero-CO₂ cement Through carbonation of Calcium Silicates and aluminates » a débuté au 1er janvier 2024. Ce projet porte sur la valorisation et le stockage du CO₂ par le recyclage du ciment. Jeswin Jiji, doctorant dans l'équipe PCMC2 a commencé sa thèse dans ce cadre. Il se concentrera sur la modélisation moléculaire de la carbonatation de l'hydrate principal du ciment. Les propositions de projet ADVANCE et CODICE portant respectivement sur l'impression 3D du béton et les accélérateurs de prise pour les ciments bas carbone ont été soumises à la Commission Européenne en réponse à l'édition de ses appels à projets HORIZON-MSCA-2024-DN-01-01 et HORIZON-EIC-2024-PATHFINDERCHALLENGES-01-02

CHIMIE DE SURFACE ET COMPORTEMENT TRIBOLOGIQUE

Une collaboration s'est nouée récemment entre les laboratoires FEMTO-ST et ICB pour l'étude de la tribochimie de surfaces. La thématique, développée initialement par Guillaume Colas (FEMTO-ST) a en effet trouvé au département INTERFACES (L. Imhoff et M. C. Marco de Lucas) et au DTAI (O. Heintz) de l'ICB les compétences nécessaires en analyse de surfaces (spectroscopie Raman, SIMS, XPS) pour caractériser et interpréter les mécanismes physico-chimiques qui interviennent lors d'un processus de frottement.

Le travail a notamment concerné le comportement tribologique de verres métalliques de type Ni₆₂Nb₃₃Zr₅ en fonction de la composition de l'élément glissant, plus particulièrement la teneur en chrome de la bille d'acier utilisée pour réaliser les tests. Les mesures initiales ont montré que le coefficient de frottement en régime permanent était très sensible à ce paramètre puisqu'il passe de 0,13 à 0,85 lorsque la teneur en chrome passe de 0 % à 17 % (avec une valeur intermédiaire à 0,15 pour une teneur en chrome de 1,5 %). Des analyses chimiques détaillées ont alors révélé que l'augmentation de la teneur en chrome favorise la perte de Nb₂O₅ ductile des oxydes protecteurs FeNbO₄ et NiNb-O en faveur des oxydes NiCrO, CrNbO₄, NiFe-O et de l'oxyde de Cr(VI). Ce travail a donné lieu à une première publication [1].



La collaboration se poursuit dans le cadre du projet CoUNTri (Contamination Utile en Tribologie : adsorber la contamination de l'air pour lubrifier) financé par l'INSIS. L'objectif et l'originalité de ce projet est d'utiliser intentionnellement la contamination par l'air ambiant pour contrôler et diminuer le frottement et l'usure en mettant intelligemment à profit les propriétés de films minces nanostructurés utilisés comme absorbeurs de cette contamination. Des résultats préliminaires ont été présentés lors d'un congrès récent [2].

[1] Tribochemistry dependence of Ni₆₂Nb₃₃Zr₅ bulk metallic glass on the Cr content of steel counterparts. Guillaume Colas, María del Carmen Marco de Lucas, Luc Imhoff, Olivier Heintz, Rémi Daudin, Alexis Lenain, Sébastien Gravier, Pierre-Henri Cornuault. Tribology International 198 (2024) 109923- <https://doi.org/10.1016/j.triboint.2024.109923>

[2] Effect of traces of ethanol airborne contamination on the tribological behaviour of SnO₂ coating, présentée au 49th Leeds-Lyon Symposium on Tribology – September 2-4, 2024, Lyon.

ORGANISATION ET PARTICIPATION DU WORKSHOP ANNUEL D'IEEE SENSORS FRANCE



Oraux du département

- Léo Simon, Dielectric oxides by microwave synthesis and development as sensitive material in ammonia microwave gas sensor;
- Marie Olivier, Potential of zeolitic materials in capturing VOCs.

RÉUNION DE FIN DU PREMIER PROJET ICB DEPARTEMENT INTERFACES AGENCE SPATIALE EUROPÉENNE (ESA)

Présentation des travaux par Alexis Lasserre - Responsables projet : C. Dupont et J. Rossignol.



THÈSES SOUTENUES

THÈSE D'ALAN ZERROUKI

9 Février 2024 « Compréhension et optimisation du procédé de dépôt par électrophorèse en mode pulse en milieu aqueux de nanoparticules modèles et d'intérêt industriel », encadrants : F. Bouyer et B. Vuillemin (Département PMDM).

Cette thèse avait pour objectif d'étudier les mécanismes à l'origine de la formation de dépôts par électrophorèse en régime pulsé et en milieu aqueux. L'objectif de cette étude était aussi d'optimiser le procédé EPD en termes de vitesse et de qualité de dépôt, en faisant appel à des suspensions de nanoparticules de silice présentant certaines caractéristiques géométriques et physicochimiques. Les cinétiques de dépôt par EPD ont été simulées à travers un modèle par éléments finis et un modèle électrochimique. Ainsi, l'hypothèse d'un mécanisme étendu de la théorie DLVO incluant une diminution du pH résultant de l'oxydation de l'eau a été mise en évidence dans le domaine des basses fréquences en régime pulsé. L'acidification du milieu a pu être limitée par diminution du rapport cyclique, donc en augmentant la période de relaxation du potentiel en régime pulsé, et en opérant à hautes fréquences ($f > 1000$ Hz).

THÈSE D'EDUARDO HERNANDO-ABAD

24 juin 2024 : « Nanoparticules de silice mesoporeuses : stabilité colloïdale et fonctionnalisation pour la formulation de nanovecteurs à visée anticancéreuse », encadrants : F. Bouyer et L. Saviot (Département Nanosciences) - (coll. avec Pr S. Roux, Besançon).

Au cours de ces travaux de thèse, des nanoparticules de silice mésoporeuses ont été synthétisées afin d'être utilisées comme vecteurs pour délivrer un agent anticancéreux, le cisplatine. Afin d'assurer la stabilité colloïdale de ces nanoparticules, deux alternatives ont été envisagées : le greffage d'un copolymère peigne et le greffage de nanoparticules d'or de très petite taille. Par greffage du copolymère, nous avons montré qu'il était possible d'encapsuler des quantités importantes d'agents anticancéreux et que ces nanoparticules pouvaient libérer de façon contrôlée l'agent anticancéreux avec un effet cytotoxique comparable au cisplatine seul. La chimie de surface des nanoparticules d'or constituées de fonctions spécifiques a permis de complexer des ions gadolinium, ce qui a été confirmé par une étude IRM. Une première étape de construction d'un lien clivable entre les nanoparticules de silice et d'or a été étudiée afin de pouvoir contrôler la libération de l'agent cancéreux.

THÈSE DE JULIA JOURDAN

7 mai 2024 : « Rôle de l'aluminium dans la réactivité pouzzolanique des métakaolins, replacé dans le contexte général de la pouzzolanité pour des ciments à bas taux de CO_2 », encadrants : L. Galois (Sorbonne Université) et S. Gauffinet - Thèse CIFRE France Ciment, collaboration Sorbonne Université-ICB.

L'objectif de cette thèse était d'une part, de mieux comprendre la structure des métakaolins, et l'influence du processus de calcination sur cette structure, à travers une approche multi-technique (DRX, ATG, FT-IR). On s'est intéressé plus particulièrement à l'environnement local autour de l'Al en utilisant la RMN-MAS du solide de l'Al²⁷ et la spectroscopie XANES au seuil K de l'Al. D'autre part, il s'agissait d'appréhender les relations structure-réactivité et d'identifier le rôle de l'Al dans la réactivité des métakaolins, à partir des essais de réactivité R3 par calorimétrie isotherme et de résistance mécanique sur des ciments de type LC3. Cette étude a été menée à partir d'un échantillonnage de différents kaolins calcinés en four flash et en four à moufle à différentes températures.

THÈSE DE FRANCK TITRE

19 septembre 2024 : « Développement d'un système de vision cosmétique pour des flacons pharmaceutiques en verre borosilicate », encadrants : F. Mairesse, Y. Voisin.

Cette thèse industrielle traite de la détection et l'identification automatique de défauts au sein de flacons pharmaceutiques en verre Borosilicate. Partant du constat, d'une part que les exigences en matière de contrôle qualité ne peuvent être atteintes avec les dispositifs actuels et d'autre part que le contrôle humain ne permet pas de maintenir une qualité stable à la cadence de production. L'étude des dernières avancées en

optique industrielle, en automatique et en traitement d'images, notamment sur les surfaces réfléchissantes, ont permis l'émergence d'un modèle de contrôle en ligne. La mise en place d'un système de vision et la comparaison entre différentes approches algorithmiques ont permis la réalisation d'une machine opérationnelle en production.

NOUVELLE ARRIVÉE

Guilherme Carneiro da Silva a rejoint l'équipe ASP pour stage post doctoral de 12 mois à partir de juin 2024 sur le sujet : « Piégeage sélectif par adsorption sur zéolithes de molécules d'isotopes de l'hydrogène » projet en collaboration avec le CEA de Valduc (troisième stage postdoctoral financé par le centre CEA de Valduc).

Résumé du projet : À partir de simulations quantiques, par DFT, et classique, Monte-Carlo et dynamique moléculaire, nous avons amélioré le modèle « classique » de ces molécules et le potentiel d'interaction entre molécules pour des applications à températures cryogéniques et à hautes pressions (plusieurs milliers de bar). Les équations d'état des systèmes purs ont pu être reproduites par simulation moléculaires pour l'hydrogène et le deutérium ce qui nous permet d'extrapoler à l'étude du tritium et de déterminer les propriétés thermodynamiques et dynamiques des mélanges. Ces résultats sont utilisés actuellement pour comprendre la thermodynamique de l'adsorption de ces molécules sur des zéolithes siliciques.