



## Synthèse de nanoparticules de graphène

**Spécialité** Chimie organique

**Niveau d'étude** Bac+5

**Formation** Master 2

**Unité d'accueil** [IRAMIS/NIMBE/LICSEN](#)

**Candidature avant le** 01-04-2018

**Durée** 5 mois

**Poursuite possible en thèse** oui

**Contact** [CAMPIDELLI Stéphane](#)  
+33 1 69 08 51 34/23 77  
[stephane.campidelli@cea.fr](mailto:stephane.campidelli@cea.fr)

### Résumé

Le terme graphène regroupe toute une famille de matériau. Dans ce projet, nous proposons de construire par des méthodes synthèses organiques des nanoparticules de graphène qui ont un intérêt fondamental pour la photoluminescence, par exemple, et qui peuvent servir de brique de base pour la réalisation de graphène de synthèse.

### Sujet détaillé

Le graphène est un matériau bidimensionnel issu, à l'origine, du graphite. Depuis sa découverte qui a valu le Prix Nobel de Physique à Geim et Novoselov en 2010, le graphène a provoqué l'engouement de la communauté scientifique. Le graphène possède des propriétés optiques, électroniques et mécaniques exceptionnelles qui en font un matériau de choix pour de très nombreuses applications : électronique/optoélectronique rapide et flexible, électrode ou matériau actif dans le domaine des énergies renouvelables (photovoltaïque, fuel cells) ou pour les composites.

De nos jours le terme graphène regroupe toute une famille de matériau : graphène obtenu par exfoliation du graphite, graphène produit par "Chemical Vapor Deposition" (croissance sur un catalyseur à partir de la décomposition d'un dérivé carboné), oxyde de graphène ou nanoparticules et rubans de graphène synthétisé grâce à des procédés de chimie organique. Ces matériaux possèdent des propriétés légèrement différentes et le matériau choisi dépendra de l'application finale.

Dans ce stage, nous proposons de synthétiser des nanoparticules de graphène et d'étudier leurs propriétés optiques et électroniques. La synthèse de motifs graphéniques originaux est basée sur la condensation de molécules polyaromatiques.1-3 Elle sera d'abord limitée à des petites molécules et ira progressivement vers la réalisation de réseaux.4;5

Ce stage demande une formation de chimiste organicien. Le stage s'effectuera au Laboratoire d'Électronique Moléculaire du CEA-Saclay. Le projet sera mené en collaboration avec d'autres équipes du CEA, de l'ENS Cachan et de l'ENS Paris. Le/la candidate devra avoir un goût prononcé pour le travail interdisciplinaire et aimer relever des défis.

Références.

- 
1. A. J. Berresheim, M. Müller, and K. Müllen, *Chem.Rev.*, 1999, 99, 1747.
  2. X. Yan, X. Cui, B. Li, and L.-S. Li, *Nano Lett.*, 2010, 10, 1869.
  3. X. Yan, X. Cui, and L.-S. Li, *J.Am.Chem.Soc.*, 2010, 132, 5944.
  4. J. Cai, P. Ruffieux, R. Jaafar, M. Bieri, T. Braun, S. Blankenburg, M. Muoth, A. P. Seitsonen, M. Saleh, X. Feng, K. Müllen, and R. Fasel, *Nature*, 2010, 446, 470.
  5. M. Gille, A. Viertel, S. Weidner, and S. Hecht, *Synlett*, 2013, 24, 259.

### **Mots clés**

### **Compétences**

Synthèse organique, RMN, spectrométrie de masse.

### **Logiciels**

---

## **Graphene nanoparticles synthesis**

**Summary**

**Full description**

**Keywords**

**Skills**

**Softwares**



## Fabrication de surfaces repoussant l'huile et l'eau

**Spécialité** Chimie des matériaux

**Niveau d'étude** Bac+4/5

**Formation** Master 2

**Unité d'accueil** [IRAMIS/NIMBE/LIONS](#)

**Candidature avant le** 30-03-2018

**Durée** 6 mois

**Poursuite possible en thèse** oui

**Contact** [GUENOUN Patrick](#)

+33 1 69 08 74 33

[patrick.guenoun@cea.fr](mailto:patrick.guenoun@cea.fr)

### Résumé

Conception de surfaces omniphobes. Nous nous proposons d'aborder ce sujet en modifiant une surface (oxyde, mica, silice, ...) en modulant sa rugosité et en y greffant des molécules adaptées.

### Sujet détaillé

Lors de ce stage nous proposons de concevoir de nouveaux types de surfaces omniphobes. Il s'agit de surfaces où des liquides, hydrophiles (solutions aqueuses) ou hydrophobes (huiles, liquides organiques) se déposent sous forme de gouttes formant un angle de contact élevé avec la surface. Cette propriété est très importante pour beaucoup d'applications où l'on ne souhaite pas que le liquide réside sur la surface comme la condensation de gouttes sur un pare-brise par exemple.

Pourtant modifier une surface pour obtenir qu'à la fois huile et eau soit peu mouillantes est un réel défi technologique pour l'industrie. Nous nous proposons d'aborder ce problème en modifiant une surface (oxyde, mica, silice,...) de manière physique en modulant sa rugosité et de manière chimique en greffant des molécules adaptées.

Nous aborderons aussi une autre méthode pour éviter qu'une goutte, même d'angle de contact faible, réside sur une surface: il s'agit de réaliser des surfaces glissantes, là aussi grâce à un greffage adapté qui rend le substrat « liquide ».

### Mots clés

Physico-chimie, polymères

### Compétences

Mesures d'angle de contact, microscopie à force atomique, spectroscopie, chimie de surface

### Logiciels



---

## **Design of non-wetted surfaces by both water and oil**

### **Summary**

Design of new types of omniphobic surfaces. We intend to address this topic by modifying a surface (oxide, mica, silica, ...) in a physical way by modulating its roughness and by a suitable chemical grafting of molecules.

### **Full description**

During this internship we propose to design new types of omniphobic surfaces. On such surfaces the deposition of hydrophilic (like aqueous solutions) or hydrophobic liquid (oil, organic liquids) forms droplets, with a wide contact angle with the surface. This property is important for many applications, where it is not intended that the liquid stays on the surface, as for example the condensation drops on a windshield.

Yet, modifying a surface to obtain that both oil and water are not wetting, is a strong technological challenge for the industry. We intend to address this topic by modifying a surface (oxide, mica, silica, ...) in a physical way by modulating its roughness and by a suitable chemical grafting of molecules.

### **Keywords**

### **Skills**

### **Softwares**



## Dynamique de la conformation de la chromatine lors de la réplication de l'ADN chez les eucaryotes

**Spécialité** Biophysique

**Niveau d'étude** Bac+5

**Formation** Master 2

**Unité d'accueil** [IRAMIS/NIMBE/LIONS](#)

**Candidature avant le** 02-04-2018

**Durée** 6 mois

**Poursuite possible en thèse** oui

**Contact** [GUENOUN Patrick](#)

+33 1 69 08 74 33

[patrick.guenoun@cea.fr](mailto:patrick.guenoun@cea.fr)

**Autre lien** <http://iramis.cea.fr/Pisp/frederic.gobeaux/>

### Résumé

Nous proposons dans ce stage d'étudier les relations entre la structure de la chromatine à des échelles entre 1 et 100 nm et la dynamique de réplication de l'ADN. Pour cela, nous utiliserons la diffusion des rayons X aux petits angles pour déterminer la conformation de la chromatine, et la cytométrie en flux pour suivre la duplication du génome.

### Sujet détaillé

L'ADN génomique est associé à tout instant à des protéines. Le complexe protéique le plus abondamment présent le long de l'ADN est appelé nucléosome. Les nucléosomes confèrent à l'ADN une structure tridimensionnelle appelée la chromatine. L'organisation tridimensionnelle du génome et sa dynamique dans des cellules vivantes sont déterminantes pour ses fonctions. Il est donc crucial de les comprendre et d'identifier les paramètres qui les contrôlent.

Cependant, les connaissances actuelles ne permettent pas encore de décrire à toutes les échelles spatiales la structure locale et globale de la chromatine lors des processus de régulation du cycle cellulaire comme la réplication.

Nous proposons dans ce stage d'étudier les relations entre la structure de la chromatine à des échelles entre 1 et 100 nm et la dynamique de réplication de l'ADN. Pour cela, nous utiliserons la diffusion des rayons X aux petits angles pour déterminer la conformation de la chromatine, et la cytométrie en flux pour suivre la duplication du génome. La diffusion sera réalisée directement sur des ensembles de cellules synchronisées dans leur évolution. En utilisant des concepts issus de la physique des polymères nous quantifierons les relations entre la dynamique de la réplication et la structure de la chromatine.

Nous utiliserons comme système modèle la levure de boulanger, *Saccharomyces cerevisiae*. Comme pour toute cellule eucaryote, le cycle cellulaire de la levure comprend trois phases avant sa division : 1) la préparation de l'ADN à la duplication (phase G1), 2) la duplication de l'ADN (phase S) et 3) le contrôle de l'ADN dupliqué et la préparation à la division cellulaire (phase G2). Des cellules de *S. cerevisiae* de type a seront synchronisées à la fin de leur phase G1 grâce à une phéromone sexuelle appelée facteur  $\alpha$ . En enlevant ce dernier de la solution par lavages successifs, la population de cellules synchronisées à la fin de la phase G1 est relâchée dans la phase S où de manière concomitante nous effectuons des mesures de diffusion des rayons X aux petits angles et des prélèvements

---

d'échantillons destinés à être analysés par cytométrie de flux.

Ce stage s'effectue en collaboration avec Arach GOLDAR, DRF//JOLIOT/SBIGEM/LTG (laboratoire spécialisé dans l'étude de l'ADN)

Lieu :  
CEA/Saclay,

### **Mots clés**

Physique statistique

### **Compétences**

Culture cellulaire, Diffusions aux petits angles, Cytométrie en flux, Analyse du signal Physique statistique Physique des polymères Modélisation (analytique et numérique).

### **Logiciels**



---

## **Dynamics of chromatin conformation for DNA replication in eukaryotes**

### **Summary**

We propose here to study the relations between chromatin structure at lengthscales in between 1 and 100nm and DNA replication dynamics. X-ray scattering will be used to determine chromatin conformation and flux cytometry for following genome duplication.

### **Full description**

### **Keywords**

### **Skills**

### **Softwares**



## Analyse de la compaction de l'ADN par des peptides amyloïdes bactériens

**Spécialité** Biophysique

**Niveau d'étude** Bac+4/5

**Formation** Master 2

**Unité d'accueil** [IRAMIS/LLB/GBSD](#)

**Candidature avant le** 31-12-2017

**Durée** 6 mois

**Poursuite possible en thèse** oui

**Contact** [ARLUISON Véronique](#)

+33 1 69 08 32 82

[veronique.arluison@cea.fr](mailto:veronique.arluison@cea.fr)

### Résumé

### Sujet détaillé

Hfq is a bacterial pleiotropic regulator that mediates several aspects of nucleic acids metabolism. The protein notably influences translation and turnover of cellular RNAs. Although most previous contributions concentrated on Hfq's interaction with RNA, its association to DNA has also been observed. With this project, we want to focus on DNA-compacting properties of Hfq. Various experimental technologies, including fluorescence microscopy imaging, atomic force microscopy, small angle neutron scattering and IR Nanospectroscopy will be used to follow the assembly of Hfq on DNA. In particular, we would like to evaluate how Hfq amyloid region helps to form a nucleoprotein complex in order to compact DNA into a condensed form and how it changes the mechanical properties of the double helix. The conclusions will be paramount to understand the implications of this protein in gene regulation.

Further reading:

K. Jiang, C. Zhang, D. Guttula, F. Liu, J. A. van Kan, C. Lavelle, K. Kubiak, A. Malabirade, A. Lapp, V. Arluison, and J. R. C. van der Maarel, Effects of Hfq on the conformation and compaction of DNA, *Nucleic Acids Research* 43, 4332-4341 (2015).

J. R. C. van der Maarel, D. Guttula, V. Arluison, S. U. Egelhaaf, I. Grillo, and V. T. Forsyth. Structure of the H-NS-DNA nucleoprotein complex, *Soft Matter* 12, 3636-4220 (2016)

A. Malabirade, K. Jiang, K. Kubiak, A. Diaz-Mendoza, F. Liu, J. A. van Kan, J. F. Berret, V. Arluison and J. R.C. van der Maarel (2017). "Compaction and condensation of DNA mediated by the C-terminal domain of Hfq." *Nucleic Acids Res* in press (2017)

### Mots clés

compaction de l'ADN; structuration du genome

### Compétences

---

**Logiciels**

---

## **Understanding DNA condensation induced by bacterial Amyloids**

### **Summary**

Nucleoid associated proteins NAPs are regulators of bacterial gene expression. As architectural proteins, they change the mechanical properties of DNA. We aim to understand how bacterial amyloid self-assemblies can influence DNA compaction.

### **Full description**

### **Keywords**

Molecular Biology, Biochemistry

### **Skills**

Molecular Biology, Biophysics, Biochemistry Circular Dichroism/Synchrotron radiation Circular Dichroism

### **Softwares**



## Relaxation électronique dans des biomolécules en phase gazeuse, une modélisation de la stabilité photochimique des constituants du vivant.

**Spécialité** Physique moléculaire

**Niveau d'étude** Bac+4/5

**Formation** Ingénieur/Master

**Unité d'accueil** [IRAMIS/LIDyL/SBM](#)

**Candidature avant le** 30-04-2018

**Durée** 4 mois

**Poursuite possible en thèse** oui

**Contact** [BRENNER Valérie](#)  
+33 1 69 08 37 88  
[valerie.brenner@cea.fr](mailto:valerie.brenner@cea.fr)

### Résumé

Calcul des états excités de systèmes d'intérêt biologique - Détermination des mécanismes de relaxation - Dynamique non-adiabatique et méthode "Coupled Cluster" (CC)

### Sujet détaillé

De nombreux systèmes moléculaires complexes absorbent la lumière dans l'UV, certains d'extrême importance pour la biologie, comme les bases de l'ADN ou les protéines. Les états excités peuplés par l'absorption UV bénéficient de mécanismes de désactivation d'importance majeure pour la photostabilité de ces espèces. Ces processus, souvent ultrarapides, offrent un moyen rapide et efficace de dissiper l'excitation électronique sous forme de vibration, évitant ainsi les réactions photochimiques conduisant généralement à des dommages structurels susceptibles d'affecter la fonction biologique du système. Notre connaissance de ces processus qui contrôlent la durée de vie de l'état excité peut être approfondie à travers l'étude en phase gazeuse de systèmes d'intérêt biologique modèles mimant des fragments des constituants du vivant comme par exemple, les peptides pour les protéines. La taille des systèmes, leur flexibilité, la présence de liaisons non-covalentes qui gouvernent les structures et la nature très diversifiée des états excités nécessitent d'avoir recours à des modèles théoriques sophistiqués pour une complète caractérisation des structures et la détermination des mécanismes de relaxation des premiers états excités. L'objectif principal de ce stage est donc de mettre au point une stratégie calculatoire faisant appel à des méthodes de chimie quantique sophistiquées permettant non seulement la caractérisation des premiers états excités de ces systèmes mais aussi une modélisation partielle des surfaces d'énergie potentielle de ces états afin d'en appréhender la dynamique électronique. Enfin, il est en relation directe avec des expériences de spectroscopies menées dans l'équipe, expériences utilisant les récents développements des techniques expérimentales de spectroscopie en phase gazeuse.

### Mots clés

Modélisation, Chimie Physique

### Compétences

---

Chimie Quantique Simulation numérique - Station de travail et/ou supercalculateur

**Logiciels**

Logiciels de Chimie quantique (TURBOMOLE, GAUSSIAN) Logiciels de visualisation

---

## **Electronic relaxation in gas phase bio-relevant systems: toward a modeling of photochemical stability of life.**

### **Summary**

Computational study of excited states of bio-relevant systems - Ab initio investigations of the nonradiative relaxation mechanisms - Non-adiabatic dynamics and size-extensive Coupled Cluster (CC) methods.

### **Full description**

Many complex molecular systems absorbing light in the near UV spectral range, including those of paramount biological importance, like DNA bases or proteins, are endowed with mechanisms of excited-state deactivation following UV absorption. These mechanisms are of major importance for the photochemical stability of these species since they provide them a rapid and efficient way to dissipate the electronic energy in excess into vibration, thus avoiding photochemical processes to take place and then structural damages which affect the biological function of the system. In this context, the study of gas phase bio-relevant systems such peptides as proteins building blocks should lead to better understanding the photophysical phenomena involved in the relaxation mechanisms of life components. The focus of this work concerns the implementation of a computational strategy to both characterize the first excited states and simulate their potential energy surfaces in order to determine the relaxation pathways. This theoretical research project contains then the development, evaluation and validation of modern quantum chemical methods dedicated to excited states. It will be backed up by key gas phase experiments performed in the two partner teams of this project, experiments using recent development of the spectroscopic techniques in gas phase.

### **Keywords**

Simulation, Physical Chemistry

### **Skills**

Quantum Chemistry Simulation - Local computer and/or supercomputer

### **Softwares**

Logiciels de Chimie quantique (TURBOMOLE, GAUSSIAN) Logiciels de visualisation