



# UFR DE CHIMIE

Lettre d'information n°3  
25 janvier 2023

## Edito

Chères toutes et chers tous,

Nous avons plaisir à vous adresser ce troisième numéro de la newsletter de Chimie de Sorbonne Université, le premier de l'année 2023 que nous vous souhaitons heureuse et pleine d'accomplissements personnels et professionnels. Nous la démarrons par un appel à vos contributions afin de partager vos projets de recherche avec la communauté dans la rubrique « Ma recherche en 180 mots ». Si vous souhaitez participer, merci de nous envoyer une proposition de titre *via* l'adresse [newsletter-chimie@listes.upmc.fr](mailto:newsletter-chimie@listes.upmc.fr). L'ensemble des rubriques est tributaire de vos contributions, n'hésitez donc pas à les enrichir. Notre prochain événement sera la journée annuelle de la Chimie prévue le vendredi 10 février qui sera l'occasion d'écouter et d'échanger avec les collègues nous ayant rejoints en cette rentrée. Merci de noter cette date importante pour notre communauté dans vos agendas. Je vous annonce également la mise en place d'un agenda commun accessible *via* ce [lien](#) et regroupant les manifestations scientifiques organisées au sein de l'UFR, n'hésitez pas à l'enrichir. Enfin, nous organisons des élections partielles pour le conseil de l'UFR le 9 mars prochain afin de compléter la liste du collège BE et celle du collège U. A ce titre, nous faisons un appel à participation auprès des doctorant.e.s souhaitant prendre part pleinement à la vie de l'UFR. Je conclus cet édito en remerciant chaleureusement l'ensemble des auteur.rice.s de cette newsletter et en vous souhaitant une très bonne lecture et un bon moment de détente avec l'escape game !

Souhir Boujday, Directrice de l'UFR de chimie

## AU SOMMAIRE

### Ma recherche en 180 mots :

Modélisation de la chimie externe de l'intérieur des géants glacés | Flavio Siro Brigiano (LCT)

### Focus sur une technique expérimentale :

Qu'est-ce que la Résonance Paramagnétique Electronique (RPE) ? | Sébastien Blanchard (IPCM)

À la découverte de nos plateformes : La plateforme CAPS | Isabelle Pellerin (UFR de Chimie)

Global Women's Breakfast | Nébéwia Griffete (PHENIX)

### Ressources humaines, le saviez-vous ?

La commission des HDR - Congés annuels SNCF - Parcours professionnels et fiches métiers, concours

Nos publications récentes : Liste depuis janvier 2023

Testez vos connaissances : Escape game sur l'UFR | Karine Gherdi, Cécile Roux (UFR de chimie)

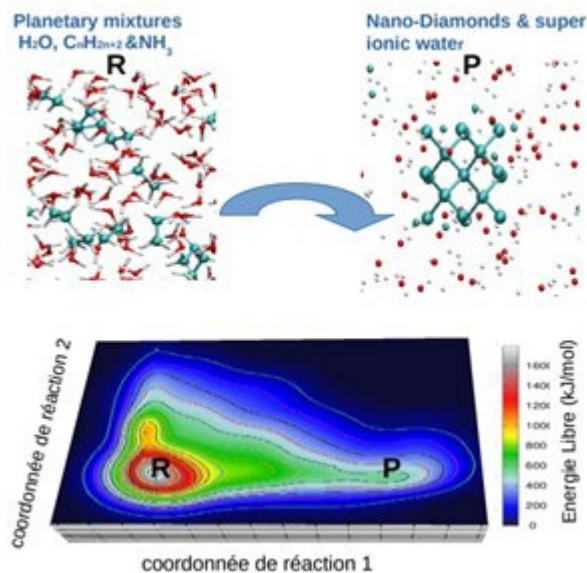
## MON PROJET DE RECHERCHE EN 180 MOTS

### Modélisation de la chimie extrême de l'intérieur des géants glacés | Flavio Siro Brigiano, Maître de conférences (LCT)



Mes activités de recherche se concentrent sur la modélisation des transformations chimiques qui se produisent au sein des différents états de la matière dans le domaine de l'astrochimie. Je suis particulièrement intéressé par la modélisation de la chimie du manteau des planètes géantes glacées telles que Neptune ou Uranus. Le manteau de ces planètes est principalement composé d'un fluide dense, mélange d'eau, de méthane et d'ammoniac. Les conditions extrêmes de pression et de température dans les géantes glacées impliquent des réactions complexes, comme la formation de diamants et d'eau super ionique (pluie de diamants).

La difficulté à caractériser ces processus "*in situ*" à partir d'expériences en raison des conditions extrêmes fait que la rationalisation moléculaire de ces processus est loin d'être atteinte. Ma recherche vise à briser les frontières de la chimie extrême, jusqu'ici inaccessible, du manteau des géantes glacées en modélisant la réactivité de mélanges fluides planétaires avec des méthodes de dynamique moléculaire *ab initio* à l'échelle nanométrique. Notre approche permet de découvrir les mécanismes de réaction et les barrières d'énergie libre en tenant compte directement des effets de l'environnement astro-chimique.



En haut, représentation schématique de la formation de nano-diamant et d'eau super ionique à partir d'un mélange planétaire. En bas, paysage d'énergie libre en fonction de deux coordonnées de réaction, associées à la formation du nano-diamant.

[Flavio Siro Brigiano](#)

## FOCUS SUR UNE TECHNIQUE EXPÉRIMENTALE

### Résonance Paramagnétique Électronique | Sébastien Blanchard, Maître de Conférences (IPCM)

#### Qu'est-ce que la Résonance Paramagnétique Électronique (RPE) ?

L'électron est une charge en mouvement (rotation sur lui-même, déplacement dans l'orbitale qu'il occupe) : il présente donc un moment magnétique  $\mu_s$  (en mécanique classique) ou, dans le monde de l'infiniment petit, un spin  $S$  (en mécanique quantique), caractérisé par un nombre quantique de spin  $S=1/2$  dont les valeurs propres  $mS=\pm 1/2$  correspondent aux orientations (parallèle ou antiparallèle) de ce moment magnétique par rapport à la direction du champ magnétique externe ( $B_0$ ). En présence de ce dernier, on observe ainsi une levée de la dégénérescence de ces deux états de spin par effet Zeeman (exactement comme pour le spin nucléaire en RMN). On peut alors, en utilisant une fréquence d'excitation adaptée, induire une transition entre ces deux niveaux et effectuer une spectroscopie d'absorption, la RPE.

Comme en RMN pour le spin nucléaire (avec le déplacement chimique et les couplages), **on sonde l'environnement direct du spin électronique**. On peut donc en tirer des informations sur le système paramagnétique étudié, mais également effectuer des études cinétiques en suivant l'évolution d'un système, des mesures de distances interatomiques,... La RPE trouve donc des applications dans tous les domaines (physique, biologie, sciences des matériaux, chimie de coordination, catalyse, ...).

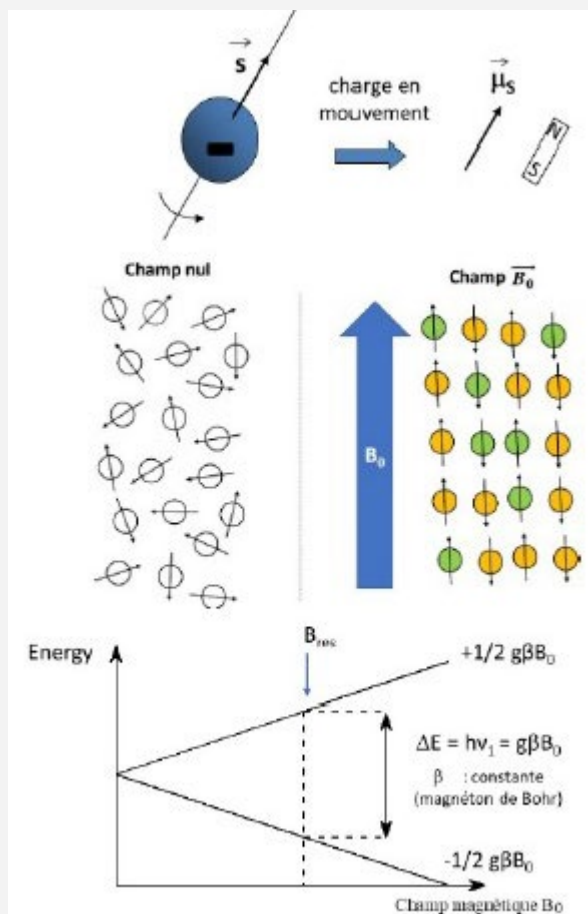
Vous avez des électrons célibataires... la RPE est faite pour vous !  
Numéro spécial de l'actualité chimique n°443, sept. 2019

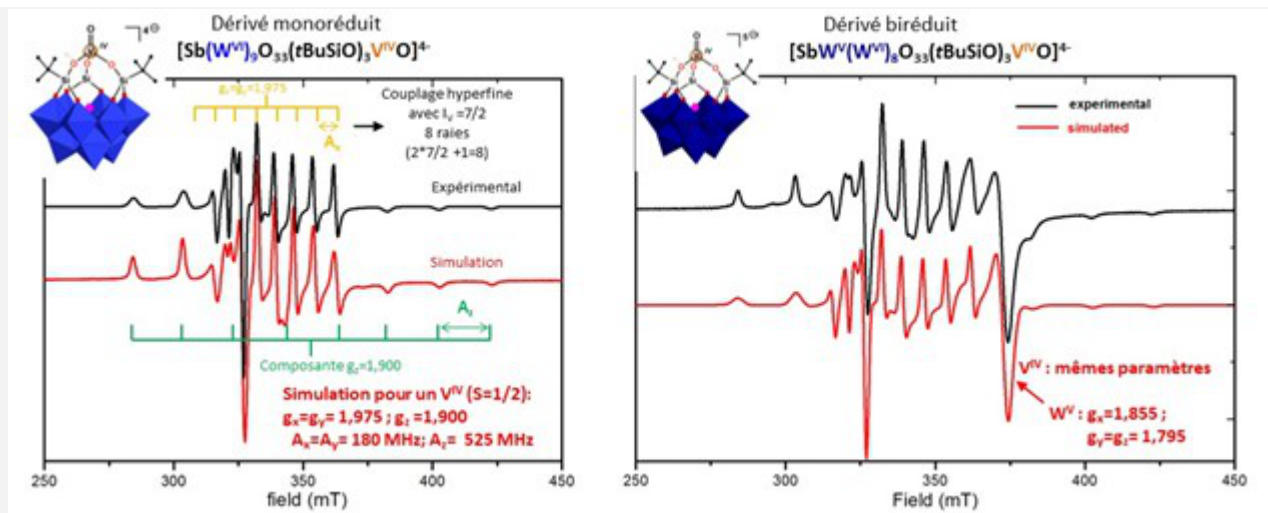
[En savoir plus](#)

#### Un exemple ?

L'étude de la structure électronique des formes monoréduites et biréduites de l'ion complexe  $[\text{SbW}_9\text{O}_{33}(\text{tBuSiO})_3\text{V}=\text{O}]^{3-}$ , modèle de site isolé pour des catalyseurs au vanadium supportés par des silices mésoporeuses ou microporeuses.

T. Zheng, S. Blanchard, G. Guillemot, *et al.*, [J. Am. Chem. Soc. 2018, 14903](#). Les spectres obtenus montrent une première réduction d'un VV en VIV ( $S=1/2$ ) caractérisée par deux signaux (système de symétrie axiale) de 8 raies dues au couplage avec le spin  $I=7/2$  du vanadium, alors que la seconde réduction est centrée sur le tungstène (WVI en WV), associée à l'apparition d'un nouveau signal, notamment vers 375 mT.





Où dans l'UFR de Chimie ? Qui contacter ? Au LRS ([Frédéric Averseng](#)) ou à l'IPCM ([Sébastien Blanchard](#)).

## À LA DÉCOUVERTE DE NOS PLATEFORMES

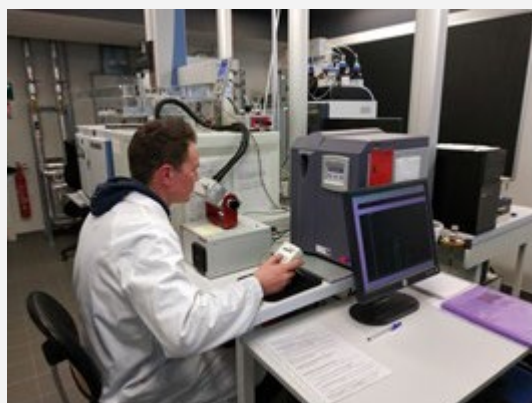
La plateforme CAPS | Isabelle Pellerin, Ingénieur d'études (UFR de Chimie)

**Qui êtes-vous ?** La plateforme CAPS – Chimie Analytique, Physique et Spectroscopies – est un service d'enseignement de l'UFR de Chimie. Actuellement, l'équipe est composée de 4 personnels techniques, dont 1 en CDD, et de 2 responsables pédagogiques.

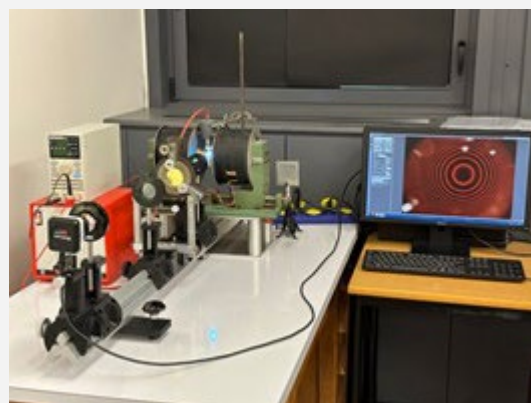
**Où êtes-vous ?** Nous sommes situés sur le campus Pierre et Marie Curie, en Tour 54, couloir 54-00, 4<sup>ème</sup> et 5<sup>ème</sup> étages.

**Quels types d'équipements sont présents sur la plateforme ?**

La plateforme CAPS dispose d'un parc varié d'appareils de séparation et de spectroscopie.



Chromatographe phase gazeuse avec détecteur olfactif



Interféromètre de Fabry-Perrot  
(Effet Zeeman en émissions visibles)

**Quel public accueillez-vous ?**

La plateforme CAPS accueille ~ 1000 étudiants-es/an, surtout de Licence (L2-L3) et Master (M1-M2) mais aussi de Polytech Sorbonne et de l'École Supérieure du Parfum (ESP) et les nombreux·ses enseignants-es encadrant les TP. Selon les UE, les étudiants-es analysent entre-autres des échantillons de la vie quotidienne (cosmétiques, médicaments, huiles essentielles...) en réalisant les préparations d'échantillons et réglages appropriés, puis l'exploitation des données.

La plateforme accueille aussi des étudiants-es/chercheurs-euses pour des prestations à la demande.

**Quelles sont vos périodes les plus chargées ?**

La période septembre-mai est la plus chargée en raison des plannings d'enseignement. A partir de mai, nous travaillons aux tests et/ou améliorations des protocoles, aux analyses pour des projets externes à la plateforme ainsi que sur les inventaires, les achats/aménagements à prévoir. En un mot, la routine n'existe pas.

En savoir plus

Contact : [Isabelle Pellerin](#)

## GLOBAL WOMEN'S BREAKFAST

### Global Women's Breakfast | Nébéwia Griffete, Maître de conférences (PHENIX)

Le bureau SCF Île-de-France a décidé de subventionner des petits déjeuners (café, thé, viennoiseries...) à l'occasion du prochain **"Global Women's Breakfast" le 14 février 2023**. Cette initiative lancée par l'*International Union of Pure and Applied Chemistry* (IUPAC) vise à développer un réseau actif, inclusif et diversifié de chimistes. *Cet événement ne s'adresse pas seulement aux femmes chimistes mais à toute la communauté de la chimie !*



C'est donc avec grand plaisir que nous organisons **avec l'UFR de chimie** ce petit déjeuner le **14 février 2023 de 9h à 12h** dans le merveilleux **espace de réception de la Tour Zamansky au 24ème étage**.

Sorbonne Université a déjà participé à ce type d'actions par le passé, par exemple en 2019 à l'occasion des 100 ans de IUPAC. Nous souhaitons réitérer ce moment convivial **avec les personnels de l'UFR de Chimie**. Cette matinée sera le lieu de débats autour d'un bon café lors de tables rondes thématiques, de discussions animées, sur divers sujets concernant la place des femmes dans le milieu scientifique !

Nous espérons vous y voir très nombreux et nombreuses !

Merci de nous rejoindre en vous inscrivant via le lien ci-dessous (inscription gratuite mais obligatoire).

<https://docs.google.com/forms/d/1deyW23oLnnThQUPq1IQ9QxCjSYmxrppoL-cqOhleiE/edit>

**Nébéwia Griffete (PHENIX)**, **Lydias Sosas-Vargas** et **Julie Oble (IPCM)**, **Natacha Krins (LCMCP)**

Pour le bureau Île de France

## RESSOURCES HUMAINES, LE SAVIEZ-VOUS ?

### LA COMMISSION DES HABILITATIONS À DIRIGER DES RECHERCHES

La prochaine réunion de la commission des HDR de chimie aura lieu la semaine du 17 avril 2023.

Les personnes qui souhaitent présenter leur dossier d'habilitation à cette échéance sont priées d'envoyer le dossier complet à la présidente de la commission [Christine Ménager](#) vers la fin du mois de mars.



[En savoir plus](#)

### CONGÉS ANNUELS SNCF



**1 fois par an, bénéficiez de 25% minimum de réduction sur l'achat de vos billets SNCF**

[En savoir plus](#)

### PARCOURS PROFESSIONNELS ET FICHES MÉTIERS / CONCOURS



Sorbonne Université soutient les personnels de l'établissement tout au long de leur parcours professionnel et les accompagne à chaque étape de leurs carrières.

[En savoir plus](#)

## NOS PUBLICATIONS RÉCENTES

[Nanostructural organization in a biredox ionic liquid](#)

R. Berthin, A. Serva, O. Fontaine and M. Salanne

*J. Phys. Chem. Lett.* 14, 1, 101-106 (2023)

[Computer simulation of the early stages of self-assembly and thermal decomposition of ZIF-8](#)

S.R.G. Balestra and R. Semino

*J. Chem. Phys.* 157, 184502 (2023)

[All-quantum dot based Forster resonant energy transfer: key parameters for high-efficiency biosensing.](#)

J. Hottechamps, T. Noblet, C. Méthivier, S. Boujday, L. Dreesen

*Nanoscale* (2023) in press.

[Allylsulfones via palladium-catalyzed allylic C–H sulfonylation of terminal alkenes](#)

T. Chen, J. Lahbi, G. Brogini, A. Pradal, G. Poli

*Eur. J. Org. Chem.* (2023)

[Silica-coated gold nanorods biofunctionalization for localized surface plasmon resonance \(LSPR\) biosensing](#)

V. Pellas, F. Sallem, J. Blanchard, A. Miche, S.M. Concheso, C. Méthivier, M. Salmain and S. Boujday

*Talanta* 255, 124245 (2023)

[Effect of Impregnation with Ammonia vs Silica Support Textural Properties on Ni Nanoparticle Catalysts for Dry Reforming of Methane](#)

O. Daoura, N. El Hassan, M. Boutros, S. Casale, P. Massiani and F. Launay

*ACS Appl. Nano Mater.* 5, 12, 18048-18059 (2023)

[Quadrupolar  \$^{23}\text{Na}^+\$  NMR relaxation as a probe of subpicosecond collective dynamics in aqueous electrolyte solutions.](#)

I. Chubak, L. Alon, E. V. Silletta, G. Madelin, A. Jerschow and B. Rotenberg,

*Nature Communications*, 14, 84 (2023)

[MetalWalls: Simulating electrochemical interfaces between polarizable electrolytes and metallic electrodes](#)

A. Coretti, C. Bacon, R. Berthin, A. Serva, L. Scalfi, L. Chubak, K. Goloviznina, M. Haefele, A. Marin-Lafèche, B. Rotenberg, S. Bonella and Mathieu Salanne

*J. Chem. Phys.* 157, 184801 (2022)

[Controlling the hydrophilicity of the electrochemical interface to modulate the oxygen-atom transfer in electrocatalytic epoxidation reactions](#)

F. Dorchies, A. Serva, D. Crevel, J. De Freitas, N. Kostopoulos, M. Robert, O. Sel, M. Salanne and A. Grimaud

*J. Am. Chem. Soc.* 144, 49, 22734-22746 (2022)

[Ranking the synthesizability of hypothetical zeolites with the sorting hat](#)

B.A. Helfrecht, G. Pireddu, R. Semino, S.M. Auerbach and M. Ceriotti

*Digital Discovery*, 6 (2022)

[Diversity-oriented synthesis and bioactivity evaluation of N-substituted ferrocifen compounds as novel antiproliferative agents against TNBC cancer cells](#)

Y. Wang, P. Pigeon, Wei Li, J. Yan, P. M. Dansette, M. Othman, M. J. McGlinchey, G. Jaouen

*European Journal of Medicinal Chemistry*, 234, 114202 (2022)

[Iron catalyzed dearomatization of pyridines into annelated azepine derivatives in a one-step, three-component reaction](#)

A. Marmontov, L. Chang, H. Dossmann, B. Bertrand, L. Dechoux, S. Thorimbert

*Org. Lett.* 2023, 25, 1, 256–260 (2022)

[Photoionization and core resonances from range-separated time-dependent density-functional theory for open-shell states: Example of the lithium atom.](#)

J. Toulouse, K. Schwinn, F. Zavata, A. Levitt, Eric Cancès and E. Luppi

*The Journal of Chemical Physics*, 157, 244104 (2022)

["Quantum versus classical unimolecular fragmentation rate constants and activation energies at finite temperature from direct dynamics simulations."](#)

F. Angiolari, S. Huppert and R. Spezia

*Phys. Chem. Chem. Phys.* 24, 29357-29370 (2022).

["A missing link in the nitrogen-rich organic chain on titan"](#)

N. Carrasco, J. Bourgalais, L. Vettier, P. Pernot, E. Giner and R. Spezia

*Astron. Astrophys.*, 663, A165 (2022).

## TESTEZ VOS CONNAISSANCES

**Escape game sur l'UFR | Karine Gherdi, Cécile Roux (UFR de chimie)**

Notions abordées :

Fonctionnement de l'UFR abordé dans le livret d'accueil de l'UFR de chimie.

Pour tout le personnel - Durée du jeu : 1h (possible de jouer en plusieurs fois)

[À vous de jouer](#)



Contact : [newsletter-chimie@listes.upmc.fr](mailto:newsletter-chimie@listes.upmc.fr)

Rédactrice en chef : Josefine Schnee

Comité éditorial : Souhir Boujday, Karine Gherdi, Cécile Roux, Josefine Schnee

Conception : Fernande Sarrazin

Sorbonne Université UFR de Chimie | 4 Place Jussieu | Paris | France | 75005 | France